

К 100-летию академика Л.Д. Ландау

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ  
И НАУКИ УКРАИНЫ**

**ХАРЬКОВСКИЙ  
НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
имени В.Н. Каразина**

**А.М. ЕРМОЛАЕВ, Г.И. РАШБА**

**Л Е К Ц И И  
ПО КВАНТОВОЙ СТАТИСТИКЕ  
И КИНЕТИКЕ**

**4. Матрица плотности**

**Учебно-методическое пособие**

**Харьков 2009**

УДК 530.145, 530.1 (075.8)  
ББК 22.317я73  
Е74

*Рекомендовано кафедрой теоретической физики  
имени академика И.М. Лифшица (протокол № 18 от 14 ноября 2008 г.)*

*Утверждено Ученым советом физического факультета  
Харьковского национального университета имени В.Н. Каразина  
(протокол № 10 от 19 декабря 2008 г.)*

**Рецензенты:**

А.С. Ковалев, доктор физ.-мат. наук, вед. научн. сотр. ФТИНТ НАН  
Украины, профессор;  
В.В. Ульянов, доктор физ.-мат. наук, профессор (ХНУ).

**Ермолаев А.М., Рашба Г.И.**

Лекции по квантовой статистике и кинетике.

**4. Матрица плотности:**

Учебно-методическое пособие для студентов физических специальностей  
университетов. – Х.: ХНУ имени В.Н. Каразина, 2009. – 69 с.

В учебно-методическом пособии изложен формализм современной квантовой статистики и кинетики, основанный на методах квантовой теории поля. Основное внимание уделено применению метода квантовых функций Грина и функциональных методов в теории конденсированного состояния вещества.

В четвертой главе изложен формализм матрицы плотности, используемый для описания смешанных состояний квантовых систем. Матрица плотности рассматривается, в частности, в базисе когерентных состояний, представляется в виде континуального интеграла.

УДК 530.145, 530.1 (075.8)  
ББК 22.317я73

© ХНУ имени В.Н. Каразина, 2009

© А.М. Ермолаев, Г.И. Рашба, 2009

## Содержание

4.	Матрица плотности.....	4
4.1.	Чистые и смешанные состояния.....	4
4.2.	Матрица плотности и статистический оператор.....	7
4.3.	Матрица плотности составной системы.....	14
4.4.	Квантовое уравнение Лиувилля.....	18
4.5.	Статистический оператор в представлениях Шредингера, Гейзенберга и Дирака.....	20
4.6.	Энтропия.....	23
4.7.	Система в термостате.....	24
4.8.	Одночастичная матрица плотности.....	27
	А. Свободная частица в термостате.....	27
	Б. Осциллятор в термостате.....	28
	В. Электрон в термостате в магнитном поле.....	30
4.9.	Спиновая матрица плотности.....	33
4.10.	Матрица плотности идеального ферми-газа.....	37
4.11.	Вигнеровская функция распределения.....	40
4.12.	Уравнение Блоха.....	47
4.13.	Матрица плотности и континуальные интегралы.....	51
4.14.	Матрица плотности и когерентные состояния.....	53
4.15.	Частичные матрицы плотности.....	56
4.16.	Характеристическая функция.....	60
4.17.	Матрица плотности и измерения.....	61
	Приложение.....	63
	Задачи.....	65

## 4. Матрица плотности

### 4.1. Чистые и смешанные состояния

В первой главе отмечалось, что состояние квантовой системы характеризуется ее волновой функцией в каком-либо представлении или полным набором физических величин, относящихся к системе. Такое состояние возникает в результате измерения полного набора величин и называется чистым состоянием. В процессе измерения путем воздействия на систему прибором, подчиняющимся законам классической механики, система возмущается, переходит из начального состояния  $\psi$  в другое состояние. В результате измерения некоторой величины  $F$  (или полного набора величин  $F_1, F_2, \dots, F_r$ ) появляется одно из собственных значений оператора  $F$ , соответствующего измеряемой величине. В общем случае предсказать какое значение величины  $F$  появится невозможно. Можно говорить лишь о вероятности того, что в процессе измерения величины  $F$  в состоянии  $\psi$  появится значение  $F_n$ . Собственные функции  $\Phi_n(q)$  и собственные значения  $F_n$  оператора измеряемой величины удовлетворяют уравнению (1.6)

$$F\Phi_n(q) = F_n\Phi_n(q). \quad (4.1)$$

Речь может идти об одновременном измерении полного набора величин. Соответствующие им операторы имеют общие собственные функции. Они образуют полный и ортонормированный базис  $\{\Phi_n\}$  в пространстве состояний системы. Для получения вероятности обнаружить значение  $F_n$  в процессе измерения в состоянии  $\psi$  необходимо разложить функцию  $\psi$  по базисным функциям  $\Phi_n$ :

$$\psi(q, t) = \sum_n C_n(t) \Phi_n(q). \quad (4.2)$$

Тогда величина  $|C_n(t)|^2$  равна вероятности обнаружить в момент  $t$  значение  $F_n$  в состоянии  $\psi$ . Эта вероятность удовлетворяет условию нормировки

$$\sum_n |C_n(t)|^2 = 1. \quad (4.3)$$

И лишь в том частном случае, когда  $\psi = \Phi_n$ , с достоверностью получается значение  $F_n$  в процессе измерения.

Как уже упоминалось, измерительная аппаратура, воздействуя на систему, переводит ее из исходного состояния  $\psi$  в другое состояние. Результаты повторных измерений над системой имеет смысл сравнивать с результатом первого измерения лишь в том случае, когда перед повторным измерением система возвращается в исходное состояние  $\psi$ . Можно избежать этой процедуры введя чистый квантовый ансамбль – множество копий нашей системы, находящихся в одном и том же состоянии  $\psi$ . Тогда повторные измерения можно выполнять над этими копиями, а вероятность  $|C_n(t)|^2$  трактовать как относительное число копий, при измерении над которыми появилось значение  $F_n$ .

Квантовомеханическое среднее значение величины  $F$  в состоянии  $\psi$  дается формулой

$$\bar{F} = \int dq \psi^* F \psi = \langle \psi | F | \psi \rangle, \quad (4.4)$$

где функция  $\psi$  нормирована на единицу. Используя равенство (1.36), перепишем выражение (4.4) для среднего в виде

$$\bar{F} = \text{Sp}(|\psi\rangle\langle\psi| F) = \text{Sp}(P_\psi F), \quad (4.5)$$

где

$$P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi| \quad (4.6)$$

– оператор проектирования на состояние  $|\psi\rangle$ .

Рассматриваемое здесь описание квантовых систем является наиболее подробным. Оно основано на знании полного набора величин или волновой функции. Такой способ описания позволяет находить вероятности  $|C_n|^2$  и средние значения  $\bar{F}$  физических величин. Избавиться от этих вероятностей и перейти к способу описания, принятому в классической механике, невозможно. Эти вероятности, как принято говорить, в природе вещей.

Между тем полный набор величин, а следовательно и волновая функция системы, известны не всегда. Например, в случае макроскопических систем, с которыми мы имеем дело в статистической физике и кинетике, полный набор представляет собой огромное количество величин, измерить которые практически невозможно. Обычно в эксперименте измеряется небольшое количество макроскопических величин. Возникает необходимость рассматривать такие неполным образом описанные состояния, когда полный набор по каким-то причинам неизвестен. Известен лишь набор чистых состояний  $\psi_1, \psi_2, \dots$ , в которых может находиться система, и вероятности  $w_1, w_2, \dots$  этих состояний. Состояние системы, заданное таким способом, называется смешанным состоянием. Состояния  $\psi_1, \psi_2, \dots$ , образующие смесь, могут не быть взаимно ортогональными, а вероятности  $w_1, w_2, \dots$  неотрицательны и удовлетворяют условию нормировки

$$\sum_i w_i = 1. \quad (4.7)$$

Причины появления этих вероятностей те же, что и в классической статистике. Они появляются вследствие недостаточных сведений о системе. От этих вероятностей можно, в принципе, избавиться, если удастся измерить полный набор. Тогда мы переходим к чистому состоянию системы, описанному полным образом.

Часто встречаются случаи, когда волновая функция системы не существует. Типичный пример – подсистема,

взаимодействующая с окружением. Пусть замкнутая система, состоящая из рассматриваемой подсистемы и среды, находится в чистом состоянии  $\psi(x, q)$ , где  $x$  – совокупность координат частиц подсистемы, а  $q$  – среды. Если подсистема и среда не взаимодействуют, то волновая функция замкнутой системы факторизуется:

$$\psi(x, q) = \psi_1(x)\psi_2(q), \quad (4.8)$$

где  $\psi_1(x)$  – волновая функция подсистемы, а  $\psi_2(q)$  – среды. При наличии взаимодействия подсистемы со средой представление волновой функции  $\psi$  в виде (4.8) невозможно. Другими словами, подсистема сама по себе волновой функцией не обладает. Ниже мы увидим, что подсистема находится в смешанном состоянии, которое описывается матрицей плотности.

## 4.2. Матрица плотности и статистический оператор

Смешанному состоянию системы можно сопоставить смешанный ансамбль – совокупность копий исходной системы, которые находятся в чистых состояниях  $\psi_1, \psi_2, \dots$ , входящих в смесь, причем  $w_i$  – относительное число копий, находящихся в состоянии  $\psi_i$ . Согласно (4.4) среднее значение некоторой величины  $L$  в чистом состоянии  $\psi_i$  равно

$$\bar{L}_i = \int dq \psi_i^* L \psi_i = \text{Sp}(P_{\psi_i} L). \quad (4.9)$$

Для получения среднего значения  $\langle L \rangle$  величины  $L$  в смешанном состоянии естественно усреднить квантовомеханическое среднее (4.9) по смешанному ансамблю:

$$\langle L \rangle = \sum_i w_i \bar{L}_i = \sum_i w_i \text{Sp}(P_{\psi_i} L). \quad (4.10)$$

Таким образом, среднее в смешанном состоянии (4.10) содержит два вида усреднения – квантовомеханическое усреднение, связанное со статистической природой микрочастиц, и статистическое усреднение, обусловленное недостатком информации о системе. (См., впрочем, страницы 35 и 36 в книге Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшица «Статистическая физика» (ч. 1, 1995), где авторы предостерегают от такого упрощенного понимания среднего (4.10)).

Пусть  $N$  – число независимых чистых состояний, входящих в смесь. (Это число, естественно, может быть и бесконечным.) Например, поляризация пучка света в смешанном состоянии определяется двумя состояниями поляризации  $\psi_1$  и  $\psi_2$ . Они соответствуют двум взаимно перпендикулярным линейным поляризациям или двум круговым. Разложим чистое состояние  $\psi_i$  по базисным состояниям  $\{\Phi_n\}$  (см. (4.1)):

$$\psi_i = \sum_n C_n^{(i)} \Phi_n, \quad (4.11)$$

где

$$\sum_n |C_n^{(i)}|^2 = 1.$$

Напомним, что  $|C_n^{(i)}|^2$  – вероятность обнаружить состояние  $\Phi_n$  в суперпозиции  $\psi_i$ . Обычно  $\Phi_n$  – собственные функции какого-либо оператора  $F$  (или полного набора операторов), относящегося к системе. Подставляя это разложение в среднее (4.9), получаем

$$\bar{L}_i = \sum_{nn'} L_{nn'} C_n^{(i)*} C_{n'}^{(i)}, \quad (4.12)$$

где

$$L_{nn'} = \int dq \Phi_n^*(q) L \Phi_{n'}(q) \quad (4.13)$$



– матричные элементы оператора  $L$  в базисе  $\{\Phi_n\}$ . Тогда среднее (4.10) в смешанном состоянии равно

$$\langle L \rangle = \sum_i w_i \sum_{nn'} L_{nn'} C_n^{(i)*} C_{n'}^{(i)} = \sum_{nn'} \rho_{n'n} L_{nn'}, \quad (4.14)$$

где введена матрица

$$\rho_{n'n} = \sum_i w_i C_{n'}^{(i)} C_n^{(i)*}. \quad (4.15)$$

Она называется матрицей плотности. Эта матрица для описания смешанных состояний введена Л.Д. Ландау и независимо И. фон Нейманом в 1927 году. Известно, что формула (4.14) может быть переписана в виде следа произведения двух операторов:

$$\langle L \rangle = \text{Sp}(\rho L), \quad (4.16)$$

где  $\rho$  – оператор, соответствующий матрице плотности (4.15) в базисе  $\{\Phi_n\}$ . Он называется статистическим оператором. Таким образом, зная матрицу плотности (4.15) или статистический оператор, мы можем вычислить среднее значение любой величины в смешанном состоянии. Поскольку след оператора не зависит от базиса, в котором он определен, для вычисления среднего (4.16) можно использовать любой удобный базис.

Из формулы (4.15) видно, что матрица плотности эрмитова:

$$\rho_{nn'} = \rho_{n'n}^*. \quad (4.17)$$

Это означает, что и статистический оператор эрмитов:

$$\rho^+ = \rho. \quad (4.18)$$

Если в формуле (4.16) заменить  $L$  единичным оператором, получим условие нормировки статоператора

$$\text{Sp} \rho = \sum_n \rho_{nn} = 1. \quad (4.19)$$

Комплексная матрица  $N \times N$  (4.15) имеет  $N^2$  комплексных элементов. Однако не все они независимы.

Условие эрмитовости (4.17) сводит  $N^2$  комплексных элементов к  $N^2$  вещественным числам, а условие нормировки (4.19) уменьшает число независимых вещественных параметров, задающих матрицу плотности, до  $N^2 - 1$ . Например, состояние поляризации пучка света или частиц со спином  $\frac{1}{2}$  ( $N = 2$ ) характеризуется тремя независимыми вещественными параметрами.

Записывая среднее  $\bar{L}_i$  в (4.10) в виде  $\bar{L}_i = \langle \psi_i | L | \psi_i \rangle$  и снова используя формулу (1.36), получаем

$$\rho = \sum_i w_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| = \sum_i w_i P_{\psi_i}, \quad (4.20)$$

где  $P_{\psi_i}$  – оператор проектирования на состояние  $\psi_i$ . Отсюда видно, что в случае  $w_i = \delta_{ii_0}$ , где  $\psi_{i_0}$  – чистое состояние, в котором находится система, статоператор превращается в оператор проектирования на состояние  $\psi_{i_0}$ , а среднее (4.10) совпадает с (4.5). Таким образом, статоператор системы в чистом состоянии  $|\psi\rangle$  равен

$$\rho = P_{\psi} = |\psi\rangle \langle \psi|. \quad (4.21)$$

Учитывая  $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ , находим тогда

$$\begin{aligned} \rho^2 &= |\psi\rangle \langle \psi | \psi \rangle \langle \psi| = |\psi\rangle \langle \psi| = \rho, \\ \text{Sp} \rho^2 &= 1. \end{aligned} \quad (4.22)$$

Это необходимое и достаточное условие чистоты состояния. Для смешанного состояния  $\text{Sp} \rho^2 < 1$ .

Используя представление (4.20), для любого вектора  $|\chi\rangle$  находим

$$\langle \chi | \rho | \chi \rangle = \sum_i w_i |\langle \chi | \psi_i \rangle|^2 \geq 0. \quad (4.23)$$

Это означает, что оператор  $\rho$  положительно определенный. Известно, что любой положительно определенный эрмитов оператор с конечным следом имеет дискретный спектр.

Уравнение для собственных чисел  $\rho_n$  и векторов  $|\psi_n\rangle$  статистического оператора запишем в обычном виде

$$\rho|\psi_n\rangle = \rho_n|\psi_n\rangle, \quad (4.24)$$

где

$$\langle\psi_n|\psi_m\rangle = \delta_{nm}.$$

Поскольку оператор  $\rho$  положительно определенный, то  $\rho_n \geq 0$ , а условие (4.19) дает

$$\sum_n \rho_n = 1, \text{ т.е. } 0 \leq \rho_n \leq 1.$$

Набор собственных векторов оператора  $\rho$  полный:

$$\sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| = 1. \quad (4.25)$$

Действуя на это равенство оператором  $\rho$  и учитывая (4.24), получаем

$$\rho = \sum_n \rho_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| = \sum_n \rho_n P_n \quad (4.26)$$

разложение статоператора по операторам проектирования  $P_n$  на его собственные векторы.

Подставим разложение (4.26) в среднее (4.16). Тогда получим

$$\langle L \rangle = \sum_n \rho_n \text{Sp}(|\psi_n\rangle\langle\psi_n|L). \quad (4.27)$$

Ограничимся случаем, когда спектр оператора  $L$  дискретный, т.е.

$$L|\varphi_n\rangle = L_n|\varphi_n\rangle. \quad (4.28)$$

Здесь  $L_n$  и  $|\varphi_n\rangle$  – собственные числа и векторы оператора  $L$ .

Тогда аналогично (4.26) находим

$$L = \sum_n L_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|. \quad (4.29)$$

Подставляя это разложение в (4.16), приходим к формуле

$$\langle L \rangle = \sum_n L_n w(L_n), \quad (4.30)$$

где

$$w(L_n) = \text{Sp}(\rho | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n |) = \langle \varphi_n | \rho | \varphi_n \rangle. \quad (4.31)$$

Из (4.30) видно, что  $w(L_n)$  – вероятность обнаружить значение  $L_n$  в смешанном состоянии, если только  $L_n$  – невырожденное собственное значение оператора  $L$ . Если же значение  $L_n$  вырождено, то вероятность  $w(L_n)$  необходимо просуммировать по всем состояниям, отвечающим значению  $L_n$ . Таким образом, диагональный матричный элемент матрицы плотности (4.31) в базисе  $\{\varphi_n\}$  равен вероятности обнаружить значение  $L_n$  в смешанном состоянии.

Смесь чистых состояний следует отличать от суперпозиции чистых состояний в квантовой механике. Чтобы найти разницу между ними, запишем вероятность (4.31) получить  $L_n$  в смешанном состоянии в виде

$$w(L_n) = \sum_m \rho_m \text{Sp} P_m \wp_n,$$

где  $P_m$  – оператор проектирования на собственный вектор  $|\psi_m\rangle$  оператора  $\rho$ , а  $\wp_n$  – на собственный вектор  $|\varphi_n\rangle$  оператора  $L$ . С учетом (1.36) переписываем это равенство в виде

$$w(L_n) = \sum_m \rho_m W_m(L_n), \quad (4.32)$$

где

$$W_m(L_n) = \langle \psi_m | \wp_n | \psi_m \rangle = |\langle \varphi_n | \psi_m \rangle|^2$$

– функция распределения величины  $L$  в чистом состоянии  $|\psi_m\rangle$ . Итак, функция распределения  $w(L_n)$  в смешанном состоянии суть взвешенная сумма функций распределения в

чистых состояниях  $|\psi_m\rangle$ , образующих смесь. Весовые множители равны  $\rho_m$ . Рассмотрим теперь суперпозицию чистых состояний специального вида

$$|\psi\rangle = \sum_m \sqrt{\rho_m} |\psi_m\rangle.$$

Это состояние построено из тех же чистых состояний  $|\psi_m\rangle$  и с теми же весами  $\rho_m$ , что и смешанное состояние (4.26).

Статоператор этого состояния равен

$$|\psi\rangle\langle\psi| = \sum_m \rho_m |\psi_m\rangle\langle\psi_m| + \sum_{m \neq m'} \sqrt{\rho_m \rho_{m'}} |\psi_m\rangle\langle\psi_{m'}|.$$

Подставляя это выражение в вероятность (4.31), находим

$$w(L_n) = \sum_m \rho_m W_m(L_n) + \sum_{m \neq m'} \sqrt{\rho_m \rho_{m'}} \langle\psi_{m'}|\rho_n|\psi_m\rangle. \quad (4.33)$$

Выражения (4.32) и (4.33) отличаются интерференционными слагаемыми  $\sum_{m \neq m'}$  в (4.33). Поэтому говорят, что чистое

состояние – когерентная смесь других чистых состояний, а рассматриваемая в этом разделе смесь является некогерентной.

Матрица плотности (4.15) записана в  $F$ -представлении. Если в качестве оператора  $F$  взять гамильтониан системы, мы будем иметь дело с энергетическим представлением матрицы плотности. Умножая (4.20) слева на  $\langle x|$ , а справа на  $|x'\rangle$ , где  $x$  – набор координат частиц системы, получаем матрицу плотности в координатном представлении:

$$\langle x|\rho|x'\rangle = \sum_i w_i \psi_i(x) \psi_i^*(x'). \quad (4.34)$$

Диагональный элемент этой матрицы дает  $\langle x|\rho|x\rangle dx$  – вероятность обнаружить координаты частиц системы в смешанном состоянии в интервале  $dx$ . Функция распределения частиц по импульсам  $p$  равна  $\langle p|\rho|p\rangle$ . Если смесь образована из чистых стационарных состояний  $\psi_n(x)$ , то

$$\langle x | \rho | x' \rangle = \sum_n w_n \psi_n(x) \psi_n^*(x'), \quad (4.35)$$

где  $\psi_n(x)$  – собственная функция гамильтониана системы, а  $w_n$  – вероятность присутствия состояния  $\psi_n$  в смеси.

### 4.3. Матрица плотности составной системы

Вернемся к подсистеме, взаимодействующей с окружением. Как уже отмечалось, такая система не имеет волновой функции. Ее состояние описывается матрицей плотности (см. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, Квантовая механика, 1989; А.С. Давыдов, Квантовая механика, 1973; В.В. Балашов, В.К. Долинов, Курс квантовой механики, 1982).

Пусть система, состоящая из двух подсистем 1 и 2, находится в смешанном состоянии со статистическим оператором  $\rho$ . Получим статоператоры  $\rho^{(1)}$  и  $\rho^{(2)}$  подсистем. Если  $F$  – величина, относящаяся к подсистеме 1, то ее среднее значение в состоянии  $\rho^{(1)}$  подсистемы 1 должно совпадать со средним в состоянии  $\rho$  всей системы:

$$\langle F \rangle = \text{Sp}(\rho^{(1)} F) = \text{Sp}(\rho F). \quad (4.36)$$

Для вычисления следов этих операторов введем базис  $\{\varphi_m^{(1)}(q_1)\}$  в гильбертовом пространстве  $H_1$  подсистемы 1 и базис  $\{\varphi_n^{(2)}(q_2)\}$  в пространстве  $H_2$  подсистемы 2. Здесь  $q_1$  – набор координат, включая спиновые переменные, частиц подсистемы 1, а  $q_2$  – то же самое для подсистемы 2. Базисом в пространстве состояний всей системы будет совокупность функций

$$\varphi_{mn}(q_1, q_2) = \varphi_m^{(1)}(q_1) \varphi_n^{(2)}(q_2). \quad (4.37)$$

Поскольку оператор  $F$  действует только в пространстве  $H_1$ , то

$$F \varphi_{mn}(q_1, q_2) = \left( F \varphi_m^{(1)}(q_1) \right) \varphi_n^{(2)}(q_2). \quad (4.38)$$

Результат действия оператора  $F$  на  $\varphi_m^{(1)}$  разложим по базису  $\{\varphi_m^{(1)}\}$ :

$$F \varphi_m^{(1)}(q_1) = \sum_{m'} F_{m'm}^{(1)} \varphi_{m'}^{(1)}(q_1). \quad (4.39)$$

Аналогично

$$F \varphi_{mn}(q_1, q_2) = \sum_{m'n'} F_{m'n',mn} \varphi_{m'n'}(q_1, q_2). \quad (4.40)$$

Здесь

$$F_{m'm}^{(1)} = \left\langle \varphi_m^{(1)} \left| F \right| \varphi_m^{(1)} \right\rangle, \quad F_{m'n',mn} = \left\langle \varphi_{m'n'} \left| F \right| \varphi_{mn} \right\rangle. \quad (4.41)$$

Подставляя (4.38) в (4.41), получаем

$$F_{m'n',mn} = \left\langle \varphi_{m'}^{(1)} \left| F \right| \varphi_m^{(1)} \right\rangle \left\langle \varphi_{n'}^{(2)} \left| \varphi_n^{(2)} \right\rangle = F_{m'm}^{(1)} \delta_{n'n}.$$

Следовательно, среднее (4.36) равно

$$\begin{aligned} \langle F \rangle &= \sum_{mm'} \rho_{mm'}^{(1)} F_{m'm}^{(1)} = \sum_{mm'n'n'} \rho_{mn,m'n'} F_{m'n',mn} = \\ &= \sum_{mm'} \left( \sum_n \rho_{mn,m'n} \right) F_{m'm}^{(1)}, \end{aligned}$$

где  $\rho_{mm'}^{(1)} = \left\langle \varphi_m^{(1)} \left| \rho^{(1)} \right| \varphi_{m'}^{(1)} \right\rangle$  – матрица плотности подсистемы 1,

а  $\rho_{mn,m'n'} = \left\langle \varphi_{mn} \left| \rho \right| \varphi_{m'n'} \right\rangle$  – матрица плотности всей системы.

Поскольку оператор  $F$  произвольный, отсюда получаем

$$\rho_{mm'}^{(1)} = \sum_n \rho_{mn,m'n}. \quad (4.42)$$

В операторной форме это равенство имеет вид

$$\rho^{(1)} = \text{Sp}_{(2)} \rho, \quad (4.43)$$

где  $\text{Sp}_{(2)}$  – след по индексам матрицы плотности всей системы,

относящимся к подсистеме 2.

Рассмотрим частный случай, когда вся система находится в чистом состоянии  $|\psi\rangle$ . Тогда ее статоператор равен (4.21). В результате формула (4.42) дает

$$\rho_{mm'}^{(1)} = \sum_n \langle \varphi_{mn} | \psi \rangle \langle \psi | \varphi_{m'n} \rangle. \quad (4.44)$$

Это состояние является смешанным.

Дополнительно предположим, что волновая функция всей системы факторизуется, т. е.

$$\psi(q_1, q_2) = \psi_1(q_1) \psi_2(q_2).$$

Тогда равенство (4.44) принимает вид

$$\begin{aligned} \rho_{mm'}^{(1)} &= \langle \varphi_m^{(1)} | \psi_1 \rangle \langle \psi_1 | \varphi_{m'}^{(1)} \rangle \sum_n \left| \langle \varphi_n^{(2)} | \psi_2 \rangle \right|^2 = \\ &= \langle \varphi_m^{(1)} | \psi_1 \rangle \langle \psi_1 | \varphi_{m'}^{(1)} \rangle, \end{aligned} \quad (4.45)$$

поскольку

$$\sum_n \left| \langle \varphi_n^{(2)} | \psi_2 \rangle \right|^2 = \sum_n \langle \psi_2 | \varphi_n^{(2)} \rangle \langle \varphi_n^{(2)} | \psi_2 \rangle = \langle \psi_2 | \psi_2 \rangle = 1$$

в силу полноты набора  $\{\varphi_n^{(2)}\}$  и нормировки  $\psi_2$ . Из (4.45) следует

$$\rho^{(1)} = |\psi_1\rangle \langle \psi_1|,$$

т. е. подсистема 1 находится в чистом состоянии. Это относится и к подсистеме 2.

Если подсистемы 1 и 2 взаимодействуют, а вся система обладает волновой функцией  $\psi(q_1, q_2)$ , то она не факторизуется. Однако  $\psi$  может быть разложена по собственным функциям  $\varphi_k(q_1)$  некоторого оператора  $K$ , относящегося к подсистеме 1:



$$\psi(q_1, q_2) = \sum_k \varphi_k(q_1) \Phi_k(q_2), \quad (4.46)$$

где  $\Phi_k(q_2)$  – коэффициенты разложения. Пусть величина  $F$  по-прежнему относится только к подсистеме 1. Оператор  $F$  действует только на  $\varphi_k(q_1)$ . Среднее значение величины  $F$  в состоянии (4.46) равно

$$\bar{F} = \int dq_1 \int dq_2 \psi^*(q_1, q_2) F \psi(q_1, q_2). \quad (4.47)$$

Подставляя сюда разложение (4.46), получаем

$$\bar{F} = \sum_{kk'} \rho_{kk'} F_{k'k}, \quad (4.48)$$

где

$$\rho_{kk'} = \int dq_2 \Phi_k(q_2) \Phi_{k'}^*(q_2) \quad (4.49)$$

матрица плотности подсистемы 1 в  $k$ -представлении,

$$F_{k'k} = \int dq_1 \varphi_{k'}^*(q_1) F \varphi_k(q_1).$$

Если спектр оператора  $K$  непрерывный, суммы по  $k$  необходимо заменить интегралами.

Для получения матрицы плотности в координатном представлении перепишем среднее (4.47) в виде

$$\bar{F} = \int dq_1 \int dq'_1 \rho(q_1, q'_1) \langle q'_1 | F_{q_1} | q_1 \rangle, \quad (4.50)$$

где

$$\rho(q_1, q'_1) = \int dq_2 \psi(q_1, q_2) \psi^*(q'_1, q_2) \quad (4.51)$$

– матрица плотности в координатном представлении, а

$$\langle q'_1 | F_{q_1} | q_1 \rangle = F_{q_1} \delta(q'_1 - q_1)$$

– матричный элемент оператора  $F_{q_1}$  в этом представлении.

Подставляя разложение (4.46) в (4.51), получаем связь матрицы плотности в координатном представлении с матрицей плотности в  $k$ -представлении:

$$\rho(q_1, q'_1) = \sum_{kk'} \rho_{kk'} \varphi_{k'}^*(q'_1) \varphi_k(q_1). \quad (4.52)$$

Это соотношение часто используется в приложениях.

#### 4.4. Квантовое уравнение Лиувилля

До сих пор мы рассматривали смешанное состояние системы и матрицу плотности в определенный момент времени. Сейчас выясним, как она зависит от времени.

Вектор чистого состояния  $|\psi_i\rangle$ , входящего в смесь (4.20), зависит от времени по закону (1.39)

$$|\psi_i(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi_i(t_0)\rangle, \quad (4.53)$$

если только в промежутке между моментом времени  $t$  и начальным моментом  $t_0$  не производилось измерение над системой и не уточнялись вероятности  $w_i$ . Здесь  $U$  – оператор эволюции системы. Подставляя кет-вектор (4.53) и соответствующий ему бра-вектор

$$\langle\psi_i(t)| = \langle\psi_i(t_0)|U^\dagger(t, t_0), \quad (4.54)$$

в (4.20), получаем

$$\rho(t) = U(t, t_0)\rho(t_0)U^\dagger(t, t_0), \quad (4.55)$$

где

$$\rho(t_0) = \sum_i w_i |\psi_i(t_0)\rangle\langle\psi_i(t_0)| \quad (4.56)$$

– статоператор в начальный момент  $t_0$ . В том случае, когда гамильтониан  $H$  системы не зависит от времени, оператор эволюции равен (1.38), а соотношение (4.55) принимает вид

$$\rho(t) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)\right]\rho(t_0)\exp\left[\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)\right]. \quad (4.57)$$

Чтобы получить уравнение движения для  $\rho(t)$ , необходимо продифференцировать по времени статоператор (4.55) с учетом уравнений (1.44) и (1.45) для оператора эволюции. Тогда получим

$$i\hbar \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = [H(t), \rho(t)]. \quad (4.58)$$

Это уравнение называется квантовым уравнением Лиувилля. Начальное условие к нему имеет вид

$$\rho(t)|_{t=t_0} = \rho(t_0). \quad (4.59)$$

Интегрируя уравнение (4.58) по времени и учитывая (4.59) получаем интегральное уравнение для статистического оператора:

$$\rho(t) = \rho(t_0) - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' [H(t'), \rho(t')]. \quad (4.60)$$

В гл. 6 мы рассмотрим решение этого уравнения методом итераций.

Получим уравнение для матрицы плотности в энергетическом представлении в важном случае, когда гамильтониан системы равен

$$H(t) = H_0 + V(t), \quad (4.61)$$

где  $H_0$  от времени не зависит, а  $V(t)$  – взаимодействие системы с переменным внешним полем. Это поле индуцирует переходы системы между собственными состояниями  $|n\rangle$  гамильтониана  $H_0$ . Разложение вектора состояния системы по базисным векторам  $|n\rangle$  имеет вид

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n C_n(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) |n\rangle, \quad (4.62)$$

где

$$H_0 |n\rangle = E_n |n\rangle. \quad (4.63)$$

Зависимость (4.62) от времени, обусловленная взаимодействием  $V$ , содержится в коэффициентах разложения  $C_n$ . Матричные элементы гамильтониана (4.61) в  $n$ -представлении равны

$$\langle n|H(t)|n'\rangle = E_n\delta_{nn'} + \langle n|V(t)|n'\rangle. \quad (4.64)$$

Умножая уравнение Лиувилля (4.58) слева на  $\langle n'|$  и справа на  $|n\rangle$ , учитывая (4.63) и (4.64), получаем

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho_{n'n}(t) = (E_{n'} - E_n) \rho_{n'n}(t) + \langle n'|[V(t), \rho(t)]|n\rangle, \quad (4.65)$$

где  $\rho_{n'n}(t)$  — матрица плотности в энергетическом представлении. Это уравнение часто используется в кинетике.

#### 4.5. Статистический оператор в представлениях Шредингера, Гейзенберга и Дирака

Статистический оператор (4.55) записан в представлении Шредингера. В этом представлении он зависит от времени через оператор эволюции. Поэтому от времени зависит и среднее значение (4.16) физической величины  $L$ :

$$\langle L_S(t) \rangle = \text{Sp}[\rho_S(t) L_S(t)]. \quad (4.66)$$

В этой формуле предполагается, что и оператор  $L$  в представлении Шредингера зависит от времени. В противном случае

$$\langle L_S(t) \rangle = \text{Sp}[\rho_S(t) L_S(t_0)]. \quad (4.67)$$

(см. У. Люиселл, Излучение и шумы в квантовой электронике, 1972). Вся зависимость от времени среднего (4.67) определяется статистическим оператором.

Пользуясь независимостью среднего от представления

$$\langle L_S(t) \rangle = \langle L_H(t) \rangle, \quad (4.68)$$

перейдем в формуле (4.66) к представлению Гейзенберга. Для этого подставим в (4.66) оператор (4.55)

$$\rho_S(t) = U(t, t_0) \rho_S(t_0) U^+(t, t_0). \quad (4.69)$$

Получим

$$\begin{aligned} \langle L_S(t) \rangle &= \text{Sp} [U(t, t_0) \rho_S(t_0) U^+(t, t_0) L_S(t)] = \\ &= \text{Sp} [\rho_S(t_0) U^+(t, t_0) L_S(t) U(t, t_0)] = \text{Sp} [\rho_S(t_0) L_H(t)]. \end{aligned} \quad (4.70)$$

Здесь мы циклически переставили операторы под знаком Sp и ввели оператор величины  $L$  в представлении Гейзенберга (1.52). Учитывая (4.68) и требуя, чтобы в начальный момент  $t_0$  статоператоры в обоих представлениях совпадали, получаем

$$\langle L_H(t) \rangle = \text{Sp} [\rho_H L_H(t)]. \quad (4.71)$$

Таким образом, в представлении Гейзенберга статоператор от времени не зависит, вся зависимость среднего (4.71) от времени содержится в гейзенберговском операторе усредняемой величины.

Если гамильтониан системы имеет вид (4.61), удобно перейти к представлению Дирака. Шредингеровский вектор состояния  $|\psi_i\rangle$ , входящий в формулу (4.20), связан с вектором состояния в представлении Дирака соотношением (1.62)

$$|\psi_S^i(t)\rangle = U_0(t, t_0) |\psi_D^i(t)\rangle.$$

Подставляя это выражение и ему сопряженное в (4.20) и требуя, чтобы

$$\rho_S(t_0) = \rho_H(t_0) = \rho_D(t_0), \quad (4.72)$$

получаем

$$\rho_S(t) = U_0(t, t_0) \rho_D(t) U_0^+(t, t_0), \quad (4.73)$$

где

$$\rho_D(t) = \sum_i w_i \left| \psi_D^i(t) \right\rangle \left\langle \psi_D^i(t) \right| \quad (4.74)$$

– статистический оператор в представлении Дирака. Если гамильтониан  $H_0$  от времени не зависит, то

$$U_0(t, t_0) = \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} H_0 (t - t_0) \right]. \quad (4.75)$$

Подставляя (4.73) в уравнение движения (4.58) и учитывая уравнения (1.63) и (1.66), приходим к уравнению для статоператора (4.74) в представлении Дирака:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho_D(t) = [V_D(t), \rho_D(t)], \quad (4.76)$$

где  $V_D(t)$  – оператор взаимодействия (1.70) в представлении Дирака. Уравнение (4.76) с начальным условием

$$\rho_D(t)|_{t=t_0} = \rho_D(t_0) \quad (4.77)$$

эквивалентно интегральному уравнению

$$\rho_D(t) = \rho_D(t_0) - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' [V_D(t'), \rho_D(t')]. \quad (4.78)$$

Его удобно использовать в том случае, когда возмущение  $V$  слабое.

Если слагаемые  $H_0$  и  $V$  в (4.61) не зависят от времени, то операторы эволюции в  $S$ -представлении и в  $D$ -представлении связаны соотношением

$$S(t, t_0) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} H_0 t\right) U(t, t_0) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_0 t_0\right). \quad (4.79)$$

Чтобы получить это соотношение, учтем (1.39), (1.62) и (1.77). Тогда, подставляя (1.39) в (1.62) и сравнивая результат с (1.77), приходим к соотношению (4.79). Оно полезно в теории многочастичных систем.

## 4.6. Энтропия

Из курса статистической физики известно, что энтропия  $S$  квантовой равновесной системы определяется соотношением

$$S = -k \sum_n \rho_n \ln \rho_n, \quad (4.80)$$

где  $n$  – индекс состояния системы,  $\rho_n$  – квантовая функция распределения,  $k$  – постоянная Больцмана (см. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, Статистическая физика, ч. 1, 1995; О.М. Єрмолаєв, Г.І. Рашба, Вступ до статистичної фізики і термодинаміки, 2004). Появление одинарной суммы  $\sum_n$  в

(4.80) означает, что в этой формуле использовано представление, в котором матрица плотности диагональна (см. (4.24)). Очевидным обобщением формулы (4.80), пригодным в любом представлении, является выражение

$$S = -k \operatorname{Sp}(\rho \ln \rho), \quad (4.81)$$

где  $\rho$  – статистический оператор системы. Если в качестве базиса при вычислении следа в (4.81) выбрать собственные функции  $\psi_n$  оператора  $\rho$ , формула (4.81) примет вид (4.80).

В статистической физике экстремальные свойства энтропии используются при выводе формулы для равновесной функции распределения  $\rho_n$  подсистемы в термостате. Чтобы получить  $\rho_n$ , достаточно в формуле (4.81) использовать представление, в котором оператор  $\rho$  диагонален и повторить рассуждения, приведенные в цитированной выше литературе. Опуская вывод  $\rho_n$  для микроканонического, канонического и большого канонического распределений Гиббса, ограничимся лишь сводкой выражений для матрицы плотности и статистического оператора системы в термостате.

#### 4.7. Система в термостате

Рассмотрим равновесную систему в термостате, обменивающуюся с ним лишь энергией. Макросостояние системы характеризуется ее объемом  $V$  и температурой  $T$ . Множество независимых копий такой системы, находящихся в одном и том же макросостоянии  $(V, T)$ , но различных микросостояниях, образует канонический ансамбль Гиббса. Статистический оператор равновесной системы не зависит от времени и поэтому коммутирует с гамильтонианом  $H$  (см. (4.58)). Следовательно, он является интегралом движения. Операторы  $H$  и  $\rho$  имеют общие собственные функции. Матрица плотности  $\rho_{nn'}$  диагональна в энергетическом представлении:

$$\rho_{nn'} = \rho_n \delta_{nn'}, \quad (4.82)$$

где  $\rho_n$  – квантовая функция распределения системы. В случае канонического ансамбля

$$\rho_n = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right), \quad (4.83)$$

где  $E_n$  – уровни энергии системы,



$$Z = \sum_n \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right) \quad (4.84)$$

– статистическая сумма. Статистический оператор системы равен

$$\rho = \frac{1}{Z} e^{-\beta H}, \quad (4.85)$$

где  $\beta = 1/kT$ . Подставляя (4.82) и (4.83) в (4.52), получаем матрицу плотности в координатном представлении:

$$\rho(q, q') = \frac{1}{Z} \sum_n e^{-\beta E_n} \varphi_n(q) \varphi_n^*(q'), \quad (4.86)$$

где

$$H \varphi_n(q) = E_n \varphi_n(q). \quad (4.87)$$

Свободная энергия системы равна

$$F(V, T) = -kT \ln Z(V, T). \quad (4.88)$$

Это выражение позволяет записать статоператор (4.85) в виде

$$\rho = \exp\left(\frac{F - H}{kT}\right). \quad (4.89)$$

Рассмотрим большой канонический ансамбль Гиббса. Он образован равновесными системами, обменивающимися с термостатом энергией и частицами. Макросостояние каждой копии задается объемом, температурой и химическим потенциалом  $\mu$ . Функция распределения такой системы  $\rho_{Nn}$  имеет смысл вероятности обнаружить в системе  $N$  частиц, находящихся в состоянии  $n$ . Она нормирована условием

$$\sum_{Nn} \rho_{Nn} = 1. \quad (4.90)$$

Операторы  $H$ ,  $N$  и  $\rho$  взаимно коммутируют. Матрица плотности диагональна в  $(N, n)$ -представлении:

$$\rho_{Nn, N'n'} = \rho_{Nn} \delta_{NN'} \delta_{nn'}, \quad (4.91)$$

где

$$\rho_{Nn} = \frac{1}{\Xi} \exp \left[ -\beta (E_{Nn} - \mu N) \right], \quad (4.92)$$

$E_{Nn}$  – уровни энергии системы,

$$\Xi = \sum_{Nn} \exp(-\beta E'_{Nn}) \quad (4.93)$$

– большая статсумма,  $E'_{Nn} = E_{Nn} - \mu N$ . Статооператор большого канонического ансамбля равен

$$\rho = \frac{1}{\Xi} e^{-\beta H'}, \quad (4.94)$$

где  $H' = H - \mu N$ . Матрица плотности в координатном представлении дается формулой (4.52):

$$\rho(q, q') = \frac{1}{\Xi} \sum_{Nn} e^{-\beta E'_{Nn}} \varphi_{Nn}(q) \varphi_{Nn}^*(q'), \quad (4.95)$$

где  $\{\varphi_{Nn}\}$  – общие собственные функции операторов  $H$ ,  $N$  и  $\rho$ . Выражение для большого потенциала

$$\Omega(V, T, \mu) = -kT \ln \Xi(V, T, \mu) \quad (4.96)$$

позволяет переписать статоператор (4.94) в виде

$$\rho = \exp \left( \frac{\Omega - H'}{kT} \right). \quad (4.97)$$

В более общем случае, когда кроме энергии и числа частиц состояние системы характеризуется другими интегралами движения  $A_l$ , статоператор (4.97) заменяется на

$$\rho = \exp \left( \frac{\Omega' - H' + \sum_l a_l A_l}{kT} \right), \quad (4.98)$$

где теперь

$$\Omega'(V, T, \mu, \dots, a_l, \dots) = -kT \ln \text{Sp} \exp \left( \frac{\sum_l a_l A_l - H'}{kT} \right), \quad (4.99)$$

а постоянные  $a_l$  определяются из условий

$$\langle A_l \rangle = \text{Sp}(\rho A_l). \quad (4.100)$$

#### 4.8. Одночастичная матрица плотности

Формулы, приведенные в предыдущем разделе, относятся к любой равновесной системе взаимодействующих частиц. В этом разделе мы рассмотрим простейшие системы, находящиеся в равновесии с термостатом, — свободную частицу, осциллятор, электрон в магнитном поле. Матрица плотности таких систем в координатном представлении получается из (4.86) заменой набора координат  $q$  на радиус-вектор  $\vec{r}$  и спиновую переменную  $\alpha$  частицы, индекса состояния  $n$  — на набор  $k$  квантовых чисел частицы, включающий спиновое квантовое число, а  $\varphi_n(q)$  — на собственную функцию гамильтониана частицы. Тогда формула (4.86) принимает вид

$$\rho_{\alpha\alpha'}(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{z} \sum_k e^{-\beta\varepsilon_k} \varphi_k(\vec{r}, \alpha) \varphi_k^*(\vec{r}', \alpha'), \quad (4.101)$$

где  $\varepsilon_k$  — энергия частицы в состоянии  $k$ ,

$$z = \sum_k e^{-\beta\varepsilon_k} \quad (4.102)$$

— одночастичная статсумма. Матрица (4.101) называется одночастичной матрицей плотности. Она записана в координатном представлении.

##### А. Свободная частица в термостате

В случае свободной частицы  $k = (\vec{p}, \sigma)$ , где  $\vec{p}$  — ее импульс, а  $\sigma$  — спиновое квантовое число,

$$\varphi_{\vec{p}\sigma}(\vec{r}, \alpha) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}\right) \chi_\sigma(\alpha) \quad (4.103)$$

– плоские волны (2.39),

$$\varepsilon_p = \frac{p^2}{2m}. \quad (4.104)$$

Поскольку энергия частицы не зависит от  $\sigma$ , имеем

$$\rho_{\alpha\alpha'}(\vec{r}, \vec{r}') = \delta_{\alpha\alpha'} \rho(\vec{r}, \vec{r}'), \quad (4.105)$$

где

$$\rho(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{zV} \sum_{\vec{p}} \exp \left[ -\beta \frac{p^2}{2m} + \frac{i}{\hbar} \vec{p}(\vec{r} - \vec{r}') \right]. \quad (4.106)$$

В (4.105) учтено условие полноты спиновых волновых функций

$$\sum_{\sigma} \chi_{\sigma}(\alpha) \chi_{\sigma}^*(\alpha') = \delta_{\alpha\alpha'}. \quad (4.107)$$

Статсумма (4.102) для частицы с нулевым спином равна

$$\begin{aligned} z &= \sum_{\vec{p}} \exp \left( -\beta \frac{p^2}{2m} \right) = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int d\vec{p} \exp \left( -\beta \frac{p^2}{2m} \right) = \\ &= \frac{V}{\hbar^3} \left( \frac{m}{2\pi\beta} \right)^{3/2} \end{aligned} \quad (4.108)$$

Дополняя показатель экспоненты под интегралом (4.106) до полного квадрата и сдвигая переменную интегрирования, получаем

$$\rho(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{V} \exp \left[ -\frac{m}{2\hbar^2\beta} (\vec{r} - \vec{r}')^2 \right]. \quad (4.109)$$

Как и следовало ожидать, плотность вероятности  $\rho(\vec{r}, \vec{r})$  координат частицы постоянна и равна  $1/V$ .

## Б. Осциллятор в термостате

Матрица плотности (4.101) одномерного гармонического осциллятора равна

$$\rho(x, x') = z^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta \varepsilon_n} \varphi_n(x) \varphi_n(x'), \quad (4.110)$$

где  $\varphi_n(x)$  – волновая функция (3.2) стационарного состояния осциллятора, а  $\varepsilon_n$  – его энергия (3.3). Входящая сюда статсумма  $z$  равна

$$z = \sum_{n=0}^{\infty} \exp \left[ -\beta \hbar \omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \right] = \frac{1}{2 \operatorname{sh} \frac{\beta \hbar \omega}{2}}. \quad (4.111)$$

Из формулы (4.110) видно, что матрица плотности симметрична:

$$\rho(x, x') = \rho(x', x). \quad (4.112)$$

Входящая в равенство (4.110) сумма вычисляется при помощи известной из теории полиномов Эрмита формулы (см. Н.Я. Виленкин, Специальные функции и теория представлений групп, 1991, с. 536<sup>1)</sup>)

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n H_n(y) H_n(z)}{2^n n!} = \\ = (1 - x^2)^{-1/2} \exp \left[ \frac{2xyz - x^2(y^2 + z^2)}{1 - x^2} \right]. \end{aligned} \quad (4.113)$$

Используя эту формулу, немедленно получаем из (4.110) и (4.111) матрицу плотности осциллятора в координатном представлении:

---

<sup>1)</sup> Пользуемся случаем отметить, что в формуле (15) на с. 536 книги Н.Я.

Виленкина  $y^2 - z^2$  необходимо заменить на  $y^2 + z^2$ . См. также формулу (16).

$$\rho(x, x') = \left( \frac{m\omega \operatorname{th} \frac{\beta\hbar\omega}{2}}{\pi\hbar} \right)^{1/2} \exp \left[ -\frac{m\omega(x^2 + x'^2)}{2\hbar \operatorname{th} \beta\hbar\omega} + \frac{m\omega x x'}{\hbar \operatorname{sh} \beta\hbar\omega} \right]. \quad (4.114)$$

Другой способ вывода этой формулы, использующий интегральное представление полиномов Эрмита и гауссов интеграл (3.79), содержится в книге Р. Кубо «Статистическая механика» (1967, с. 194). См. Приложение.

Функция распределения осциллятора по координатам равна

$$\rho(x, x) = \left( \frac{m\omega \operatorname{th} \frac{\beta\hbar\omega}{2}}{\pi\hbar} \right)^{1/2} \exp \left[ -\frac{m\omega x^2}{\hbar} \operatorname{th} \frac{\beta\hbar\omega}{2} \right]. \quad (4.115)$$

В низкотемпературном пределе  $\beta\hbar\omega \gg 1$  отсюда получаем

$$\rho(x, x) = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \exp \left[ -\frac{m\omega x^2}{\hbar} \right] = |\varphi_0(x)|^2. \quad (4.116)$$

— плотность вероятности для осциллятора в основном состоянии. Таким образом, в пределе  $T \rightarrow 0$  смешанное состояние осциллятора переходит в чистое. В области высоких температур  $\beta\hbar\omega \ll 1$  имеем

$$\rho(x, x) = \sqrt{\frac{m\omega^2 \beta}{2\pi}} \exp \left[ -\frac{\beta m\omega^2 x^2}{2} \right]. \quad (4.117)$$

— классическое распределение Больцмана.

## В. Электрон в термостате в магнитном поле

Матрица плотности электрона в термостате при наличии постоянного однородного магнитного поля равна (см. (4.101))

$$\rho(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{Z} \sum_{n k_y k_z \sigma} e^{-\beta \varepsilon_{n k_z}} \varphi_{n k_y k_z}(\vec{r}) \varphi_{n k_y k_z}^*(\vec{r}'). \quad (4.118)$$

Здесь выбрана калибровка векторного потенциала  $\vec{A} = (0, Hx, 0)$  (см. р. 1.7). Волновые функции стационарных состояний электрона и уровни Ландау равны (1.146) и (1.147). В (4.118) мы не учитываем спиновое расщепление уровней Ландау. Споровая матрица плотности будет рассмотрена в р. 4.9.

Входящая в (4.118) статсумма известна:

$$z = \sum_{nk_y k_z \sigma} \exp \left\{ -\beta \left[ \hbar \omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \right] \right\} =$$

$$= \frac{V \left( \frac{m}{\beta} \right)^{1/2}}{(2\pi)^{3/2} \hbar l^2 \text{sh} \frac{\beta \hbar \omega_c}{2}}. \quad (4.119)$$

(см. обозначения в р. 1.7). Сумма  $\sum_n$  вычисляется при помощи формулы (4.113):

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{e^{-\beta \hbar \omega_c n}}{2^n n!} H_n \left( \frac{x - x_0}{l} \right) H_n \left( \frac{x' - x_0}{l} \right) = \left( 1 - e^{-2\beta \hbar \omega_c} \right)^{-1/2} \times$$

$$\times \exp \left\{ \frac{2e^{-\beta \hbar \omega_c} \frac{(x - x_0)(x' - x_0)}{l^2} - e^{-2\beta \hbar \omega_c} \frac{1}{l^2} \left[ (x - x_0)^2 + (x' - x_0)^2 \right]}{1 - e^{-2\beta \hbar \omega_c}} \right\}.$$

Сумма  $\sum_{k_z}$  равна

$$\begin{aligned} \sum_{k_z} \exp \left[ -\beta \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + i k_z (z - z') \right] = \\ = \frac{L}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta}} \exp \left[ -\frac{m}{2\hbar^2\beta} (z - z')^2 \right]. \end{aligned} \quad (4.121)$$

Сумма  $\sum_{k_y}$  с учетом  $x_0 = -l^2 k_y$  сводится к гауссовому

интегралу по  $x_0$ . Выделяя в показателе экспоненты полный квадрат и сдвигая переменную интегрирования, получаем

$$\begin{aligned} \sum_{k_y} \exp \left[ -\frac{(x - x_0)^2 + (x' - x_0)^2}{2l^2} - i \frac{x_0}{l^2} (y - y') + \{...\} \right] = \\ = \frac{L}{2l} \sqrt{\frac{\text{cth} \frac{\beta \hbar \omega_c}{2}}{\pi}} \exp \left[ -\frac{i}{2l^2} (x + x') (y - y') \right] \times \\ \times \exp \left[ -\frac{(x - x')^2 + (y - y')^2}{4l^2} \text{cth} \frac{\beta \hbar \omega_c}{2} \right]. \end{aligned} \quad (4.122)$$

Здесь  $\{...\}$  – показатель экспоненты в (4.120). Подставляя суммы (4.119)-(4.122) в формулу (4.118), получаем матрицу плотности электрона в магнитном поле в координатном представлении:

$$\begin{aligned} \rho(x, y, z; x', y', z') = \frac{1}{V} \exp \left[ -\frac{i}{2l^2} (x + x') (y - y') \right] \times \\ \times \exp \left[ -\frac{(x - x')^2 + (y - y')^2}{4l^2} \text{cth} \frac{\beta \hbar \omega_c}{2} \right] \times \\ \times \exp \left[ -\frac{m}{2\hbar^2\beta} (z - z')^2 \right]. \end{aligned} \quad (4.123)$$

Эрмитовость этой матрицы очевидна. В пределе  $H \rightarrow 0$  эта формула переходит в (4.109). Отметим, что функция



распределения по координатам  $\rho(\vec{r}, \vec{r})$ , получаемая из (4.123), постоянна в отличие от  $|\varphi_k(\vec{r})|^2$  и  $\rho(x, x)$  осциллятора. Это связано с дополнительным интегрированием в (4.118) по координатам центра электронной «орбиты»  $x_0$ , которое устраняет следы чистого состояния.

#### 4.9. Спиновая матрица плотности

В этом разделе мы построим спиновую матрицу плотности для частиц со спином  $s = 1/2$ , не интересуясь их орбитальным движением (см. У. Люиселл, Излучение и шумы в квантовой электронике, 1972; О.Г. Ситенко, Теорія розсіяння, 1993).

Чистое состояние рассматриваемой системы изображается чистым квантовым ансамблем – совокупностью независимых частиц в одном спиновом состоянии. В смешанном состоянии копии образуют смешанный ансамбль, находятся в различных чистых состояниях.

Компонентам спина  $1/2$  соответствуют эрмитовы операторы – матрицы Паули. Обычно их записывают в представлении, в котором матрица  $\sigma_z$  диагональна:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.124)$$

Очевидно, что спиновая матрица плотности  $\rho$  также должна быть эрмитовой матрицей  $2 \times 2$ . Известно, что любая двухрядная матрица может быть представлена в виде

$$\rho = c_0 I + c_1 \sigma_x + c_2 \sigma_y + c_3 \sigma_z, \quad (4.125)$$

где

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

– единичная матрица, а  $c_i$  – неизвестные коэффициенты. Они могут быть выражены через наблюдаемые величины – компоненты среднего по ансамблю вектора спина частицы  $\vec{s}$ . Он может быть записан либо в представлении Шредингера, либо в представлении Гейзенберга:

$$\vec{s} = \langle \vec{\sigma} \rangle = \text{Sp}[\rho_s(t) \vec{\sigma}_s] = \text{Sp}[\rho_H \vec{\sigma}_H(t)]. \quad (4.126)$$

Действительно, умножим (4.125) на  $\sigma_x$  и вычислим след полученного выражения. Учтем

$$\text{Sp} \sigma_k \sigma_l = 2\delta_{kl} \quad (k, l = 1, 2, 3). \quad (4.127)$$

Тогда

$$s_x = \text{Sp}(\rho \sigma_x) = 2c_1, \quad c_1 = \frac{1}{2} s_x.$$

Аналогично

$$c_2 = \frac{1}{2} s_y, \quad c_3 = \frac{1}{2} s_z.$$

Постоянная  $c_0$  находится из условия нормировки

$$\text{Sp} \rho = 1 = 2c_0, \quad c_0 = \frac{1}{2}.$$

Подставляя коэффициенты  $c_i$  в (4.125), получаем

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + s_z & s_x - i s_y \\ s_x + i s_y & 1 - s_z \end{pmatrix}. \quad (4.128)$$

Эрмитовость этой матрицы очевидна. Таким образом, если известны три параметра  $s_x, s_y, s_z$ , матрица плотности (4.128) полностью определена (см. р. 4.2). Выражение (4.128) перепишем в виде

$$\rho = \frac{1}{2} (1 + \vec{\sigma} \vec{s}), \quad (4.129)$$

пригодном в любом представлении.

В пространстве спиновых состояний частицы выберем базис

$$|+1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |-1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (4.130)$$

Получим матрицу плотности чистого состояния, когда все члены ансамбля находятся в одинаковом состоянии, например  $|+1\rangle$ . Тогда статоператор равен оператору проектирования на это состояние (см. (4.21))

$$\rho = |+1\rangle\langle +1|. \quad (4.131)$$

Средние значения компонент вектора (4.126) в этом состоянии равны

$$s_x = \langle +1 | \sigma_x | +1 \rangle = 0,$$

$$s_y = \langle +1 | \sigma_y | +1 \rangle = 0,$$

$$s_z = \langle +1 | \sigma_z | +1 \rangle = 1.$$

Следовательно, матрица плотности (4.128) рассматриваемого чистого состояния имеет вид

$$\rho = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.132)$$

Если  $|\psi\rangle$  – любое чистое состояние, то его можно разложить по базисным состояниям (4.130):

$$|\psi\rangle = a_1 |+1\rangle + a_2 |-1\rangle. \quad (4.133)$$

Здесь  $|a_1|^2$  – вероятность обнаружить спин частицы «вверх» в состоянии  $|\psi\rangle$ , а  $|a_2|^2$  – «вниз». Коэффициенты  $a_1$  и  $a_2$  удовлетворяют условиям нормировки  $|a_1|^2 + |a_2|^2 = 1$ . Вычисляя среднее (4.126) в состоянии (4.133) и подставляя в (4.128), получаем

$$\rho = \begin{pmatrix} |a_1|^2 & a_1 a_2^* \\ a_1^* a_2 & |a_2|^2 \end{pmatrix}.$$

Легко показать, что в этом случае  $\text{Sp} \rho^2 = 1$ , как и должно быть в случае чистого состояния.

Рассмотрим поведение спинового магнитного момента частицы

$$\vec{\mu} = \gamma \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \quad (4.134)$$

в магнитном поле  $\vec{h}(t)$ . Здесь  $\gamma$  – гиромагнитное отношение. Гамильтониан взаимодействия спина с магнитным полем равен

$$H(t) = -\frac{\gamma \hbar}{2} \vec{\sigma} \vec{h}(t). \quad (4.135)$$

Среднее значение магнитного момента

$$\vec{M} = \langle \vec{\mu} \rangle = \frac{\gamma \hbar}{2} \text{Sp}[\rho(t) \vec{\sigma}]. \quad (4.136)$$

Уравнение движения (4.58) для шредингеровского статоператора принимает вид

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = [H, \rho] = -\frac{\gamma \hbar}{2} [(\vec{\sigma} \vec{h}), \rho]. \quad (4.137)$$

В смешанном состоянии статоператор равен (4.129)

$$\rho(t) = \frac{1}{2} (1 + \vec{\sigma} \vec{s}(t)). \quad (4.138)$$

Дифференцируя это соотношение по времени получаем

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2} \vec{\sigma} \frac{\partial \vec{s}}{\partial t}. \quad (4.139)$$

Подставляя (4.138) и (4.139) в уравнение (4.137), находим

$$\frac{i\hbar}{2} \vec{\sigma} \frac{\partial \vec{s}}{\partial t} = -\frac{\gamma \hbar}{4} [(\vec{\sigma} \vec{h}), (\vec{\sigma} \vec{s})]. \quad (4.140)$$

Коммутатор в правой части этого уравнения известен:

$$[(\vec{\sigma} \vec{h}), (\vec{\sigma} \vec{s})] = \sum_{kl}^3 h_k s_l [\sigma_k, \sigma_l] = 2i [\vec{h} \vec{s}] \vec{\sigma}.$$

Здесь учтено  $[\sigma_k, \sigma_l] = 2i \sigma_m$ , где индексы  $k, l, m$  получаются из 1,2,3 четной перестановкой. В результате получаем уравнение для среднего магнитного момента частицы:

$$\frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = -\gamma \left[ \vec{h} \vec{M} \right]. \quad (4.141)$$

Это уравнение совпадает с классическим уравнением движения магнитного момента в магнитном поле, описывающим прецессию вектора  $\vec{M}$  вокруг направления поля.

#### 4.10. Матрица плотности идеального ферми-газа

Получим матрицу плотности идеального газа фермионов в координатном представлении, пренебрегая ее зависимостью от спиновых переменных.

Согласно (2.90) волновая функция стационарного состояния  $N$  независимых одинаковых фермионов, находящихся в состояниях с волновыми векторами  $\vec{k}_1, \dots, \vec{k}_N$ , имеет вид

$$\Phi_{\vec{k}_1 \dots \vec{k}_N}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N! V^N}} \sum_P (-1)^P \exp \left( i \sum_{a=1}^N \vec{k}_a \vec{r}_{Pa} \right), \quad (4.142)$$

где  $P$  — операция перестановки частиц, которые пронумерованы числами  $1, \dots, N$ . При перестановке  $a$  переходит в  $Pa$ . Матрица плотности газа в термостате для канонического ансамбля равна

$$\begin{aligned} \langle \vec{r}_1 \dots \vec{r}_N | \rho | \vec{r}'_1 \dots \vec{r}'_N \rangle &= Z^{-1} \sum'_{\vec{k}_1 \dots \vec{k}_N} \exp \left( -\beta \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{a=1}^N k_a^2 \right) \times \\ &\times \Phi_{\vec{k}_1 \dots \vec{k}_N}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \Phi_{\vec{k}_1 \dots \vec{k}_N}^*(\vec{r}'_1, \dots, \vec{r}'_N), \end{aligned} \quad (4.143)$$

где  $Z$  — статсумма, а штрих у знака суммы означает, что суммирование выполняется по различным квантовым состояниям системы. Поскольку состояние  $|\vec{k}_1 \dots \vec{k}_N\rangle$  и состояние, получаемое из него перестановкой волновых векторов, тождественны, ограничение на суммирование в (4.143) можно снять, разделив сумму на  $N!$  Тогда

$$\begin{aligned} \langle \vec{r}_1 \dots \vec{r}_N | \rho | \vec{r}'_1 \dots \vec{r}'_N \rangle &= \frac{1}{Z(N!)^2 V^N} \sum_{PP'} (-1)^P (-1)^{P'} \times \\ &\times \sum_{\vec{k}_1 \dots \vec{k}_N} \exp \left( -\beta \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{a=1}^N k_a^2 \right) \exp \left[ i \sum_a \vec{k}_a (\vec{r}_{Pa} - \vec{r}'_{P'a}) \right]. \end{aligned} \quad (4.144)$$

Переходя, как обычно, к термодинамическому пределу и вычисляя интегралы по формуле (см. (4.106) и (4.109))

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \exp \left[ -\beta \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + i \vec{k} (\vec{r}_{Pa} - \vec{r}'_{P'a}) \right] &= \\ &= \frac{1}{\lambda_T^3} \exp \left( -\frac{\pi}{\lambda_T^2} |\vec{r}_{Pa} - \vec{r}'_{P'a}|^2 \right), \end{aligned} \quad (4.145)$$

получаем

$$\langle \vec{r}_1 \dots \vec{r}_N | \rho | \vec{r}'_1 \dots \vec{r}'_N \rangle = \frac{1}{Z(N!)^2 \lambda_T^{3N}} \sum_{PQ} (-1)^Q \exp \left( -\frac{\pi}{\lambda_T^2} \sum_{Pa} |\vec{r}_{Pa} - \vec{r}'_{PQa}|^2 \right).$$

Здесь  $\lambda_T = \hbar \sqrt{2\pi\beta/m}$  — тепловая длина волны де Бройля частицы, а перестановка  $P'$  представлена в виде произведения перестановок  $P$  и  $Q$ :  $P' = PQ$  (см. Р. Кубо, Статистическая механика, 1967; М.И. Петрашень, Е.Д. Трифонов, Применение теории групп в квантовой механике, 1967). Сумма  $\sum_{Pa}$  в

показателе экспоненты равна сумме по частицам, поэтому с учетом  $\sum_p 1 = N!$  получаем

$$\begin{aligned} \langle \vec{r}_1 \dots \vec{r}_N | \rho | \vec{r}'_1 \dots \vec{r}'_N \rangle &= \\ &= \frac{1}{Z N! \lambda_T^{3N}} \sum_Q (-1)^Q \exp \left( -\frac{\pi}{\lambda_T^2} \sum_a |\vec{r}_a - \vec{r}'_{Qa}|^2 \right). \end{aligned} \quad (4.146)$$

Входящую сюда статсумму находим из условия нормировки

$$\text{Sp}\rho = \int d\vec{r}_1 \dots \int d\vec{r}_N \langle \vec{r}_1 \dots \vec{r}_N | \rho | \vec{r}_1 \dots \vec{r}_N \rangle = 1.$$

В частности, в случае двух частиц в термостате статсумма равна

$$Z_2 = \frac{1}{2! \lambda_T^6} \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 (1 - f_{12}^2),$$

где

$$f_{ab} = \exp \left[ -\frac{\pi}{\lambda_T^2} (\vec{r}_a - \vec{r}_b)^2 \right].$$

В случае  $N$  частиц

$$Z = \frac{1}{N! \lambda_T^{3N}} \int d\vec{r}_1 \dots \int d\vec{r}_N \left( 1 - \sum_{a < b} f_{ab}^2 + \dots \right). \quad (4.147)$$

(см. Д.Н. Зубарев, Неравновесная статистическая термодинамика, 1971; В.Г. Левич, Ю.А. Вдовин, В.А. Мямлин, Курс теоретической физики, т.2, 1971). Первое слагаемое в правой части (4.147) совпадает с используемым в классической статистике выражением для статистического интеграла. Тем самым получает обоснование правило перехода от суммирования по квантовым состояниям к интегрированию по фазовому пространству системы

$$\sum_n \rightarrow \int \frac{dq dp}{(2\pi\hbar)^{3N} N!}$$

в квазиклассическом пределе. Видна также целесообразность сопоставления в этом пределе квантовому состоянию ячейки объема  $(2\pi\hbar)^{3N}$  в фазовом пространстве.

Второе слагаемое в формуле (4.147) содержит постоянную Планка в показателе экспоненты. Оно обусловлено квантовыми эффектами. Они малы, если тепловая длина волны частицы мала по сравнению со средним расстоянием между ними

$$\lambda_T \ll |\vec{r}_a - \vec{r}_b| = r_{ab}. \quad (4.148)$$

Это условие сводится к известному условию отсутствия вырождения газа. Отметим, что в случае бозонов знак перед вторым слагаемым в (2.1) иной, поэтому знак перед суммой в (4.147) также меняется. Если неравенство (4.148) выполняется, можем записать приближенно

$$1 \pm \sum_{a < b} f_{ab}^2 \approx \prod_{a < b} (1 \pm f_{ab}^2) \approx e^{-\beta U_{eff}},$$

где

$$\begin{aligned} U_{eff}(r_{ab}) &= -\frac{1}{\beta} \ln(1 \pm f_{ab}^2) = \\ &= -\frac{1}{\beta} \ln \left\{ 1 \pm \exp \left[ -\frac{2\pi}{\lambda_T^2} (\vec{r}_a - \vec{r}_b)^2 \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.149)$$

Верхний знак относится к бозонам, а нижний – к фермионам. Подставляя это выражение в (4.147), получаем

$$Z = \frac{1}{N!(2\pi\hbar)^{3N}} \int dp e^{-\beta \frac{p^2}{2m}} \int dq e^{-\beta U_{eff}}.$$

Видно, что квантовая поправка в выражении для  $Z$  идеального газа приводит к появлению эффективного взаимодействия между частицами. Это взаимодействие не связано с появлением новых слагаемых в гамильтониане идеального газа. Оно обусловлено симметрией волновой функции системы. Из (4.149) видно, что это взаимодействие имеет характер притяжения в случае бозонов и отталкивания в случае фермионов. В пределе  $\hbar \rightarrow 0$  оно исчезает.

#### 4.11. Вигнеровская функция распределения

Известно, что координаты  $q$  частиц системы и сопряженные им импульсы  $p$  не имеют определенных значений одновременно. Поэтому статистический оператор (4.20) позволяет найти функцию распределения частиц по координатам  $\langle q | \rho | q \rangle$  или



по импульсам  $\langle p | \rho | p \rangle$ , но отнюдь не функцию распределения  $f(q, p)$  по координатам и импульсам одновременно. Е. Вигнер (1932) показал, что распределения по координатам и импульсам порознь могут быть получены интегрированием некоторой функции, которая называется вигнеровской функцией распределения.

С целью ввести эту функцию рассмотрим сначала одночастичную матрицу плотности в координатном представлении:

$$\langle \vec{r}_1 \alpha_1 | \rho | \vec{r}_2 \alpha_2 \rangle = \sum_i w_i \psi_i(\vec{r}_1, \alpha_1) \psi_i^*(\vec{r}_2, \alpha_2), \quad (4.150)$$

где  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$  — спинные переменные. Перейдем в этом соотношении к новым переменным

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2, \quad \vec{R} = \frac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2).$$

Тогда получим (4.150) в виде

$$\left\langle \vec{R} + \frac{\vec{r}}{2}, \alpha_1 \left| \rho \right| \vec{R} - \frac{\vec{r}}{2}, \alpha_2 \right\rangle = \sum_i w_i \psi_i\left(\vec{R} + \frac{\vec{r}}{2}, \alpha_1\right) \psi_i^*\left(\vec{R} - \frac{\vec{r}}{2}, \alpha_2\right).$$

Совершим фурье-преобразование этой функции по  $\vec{r}$ :

$$f_{\alpha_1 \alpha_2}(\vec{p}, \vec{R}) = \int d\vec{r} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}\right) \left\langle \vec{R} + \frac{\vec{r}}{2}, \alpha_1 \left| \rho \right| \vec{R} - \frac{\vec{r}}{2}, \alpha_2 \right\rangle. \quad (4.151)$$

Это и есть функция распределения Вигнера. Она вещественна в силу эрмитовости матрицы плотности, однако не является положительно определенной. Поэтому ее нельзя рассматривать как функцию распределения по координатам и импульсам одновременно.

Обобщение формулы (4.151) на случай системы  $N$  частиц очевидно:

$$f_{\alpha_1 \dots \alpha_N, \alpha'_1 \dots \alpha'_N}(p, Q) = \int dq \exp\left(-\frac{i}{\hbar} pq\right) \times \\ \times \left\langle \vec{Q}_1 + \frac{\vec{q}_1}{2}, \alpha_1, \dots, \vec{Q}_N + \frac{\vec{q}_N}{2}, \alpha_N \left| \rho \right| \vec{Q}_1 - \frac{\vec{q}_1}{2}, \alpha'_1, \dots, \vec{Q}_N - \frac{\vec{q}_N}{2}, \alpha'_N \right\rangle. \quad (4.152)$$

Здесь  $p = (\vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N)$ ,  $Q = (\vec{Q}_1, \dots, \vec{Q}_N)$ ,  $\int dq = \prod_{a=1}^N d\vec{q}_a$ ,

$$pq = \sum_{a=1}^N \vec{p}_a \vec{q}_a.$$

Проинтегрируем функцию (4.151) по импульсной переменной:

$$\begin{aligned} \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} f(\vec{p}, \vec{R}) &= \\ &= \int d\vec{r} \left\langle \vec{R} + \frac{\vec{r}}{2} \left| \rho \right| \vec{R} - \frac{\vec{r}}{2} \right\rangle \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}\right) = \\ &= \langle \vec{R} | \rho | \vec{R} \rangle. \end{aligned} \quad (4.153)$$

Здесь мы опустили спинные переменные и воспользовались фурье-разложением дельта-функции Дирака (1.195). Мы получили функцию распределения по координатам (4.153).

Выполним теперь интегрирование функции (4.151) по координатам:

$$\int d\vec{R} f(\vec{p}, \vec{R}) = \int d\vec{R} \int d\vec{r} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}\right) \left\langle \vec{R} + \frac{\vec{r}}{2} \left| \rho \right| \vec{R} - \frac{\vec{r}}{2} \right\rangle.$$

Переходя здесь к прежним переменным  $\vec{r}_1, \vec{r}_2$ , получаем функцию распределения по импульсам:

$$\langle \vec{p} | \rho | \vec{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\vec{R} f(\vec{p}, \vec{R}). \quad (4.154)$$

Здесь использовано условие полноты базиса плоских волн:

$$\int d\vec{p} |\vec{p}\rangle \langle \vec{p}| = 1.$$

Нормированная на дельта-функцию плоская волна равна

$$\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = (2\pi\hbar)^{-3/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}\right).$$

Обратное преобразование Фурье функции (4.151) имеет вид

$$\begin{aligned} \langle \vec{r}_1 \alpha_1 | \rho | \vec{r}_2 \alpha_2 \rangle = & \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \vec{p} (\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \right] \times \\ & \times f_{\alpha_1 \alpha_2} \left( \vec{p}, \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2} \right). \end{aligned} \quad (4.155)$$

Запишем среднее значение одночастичного оператора  $F$  при помощи вигнеровской функции распределения (4.151). По определению среднего в смешанном состоянии

$$\langle F \rangle = \text{Sp}_\alpha \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 \langle \vec{r}_1 | \rho | \vec{r}_2 \rangle \langle \vec{r}_2 | F | \vec{r}_1 \rangle,$$

где  $\text{Sp}_\alpha$  – след по спиновой переменной. Учтем здесь (4.155) и перейдем к интегрированию по  $\vec{r}$  и  $\vec{R}$ :

$$\langle F \rangle = \text{Sp}_\alpha \int d\vec{R} \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} f(\vec{p}, \vec{R}) F(\vec{p}, \vec{R}), \quad (4.156)$$

где

$$F(\vec{p}, \vec{R}) = \int d\vec{r} \exp \left( \frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r} \right) \left\langle \vec{R} - \frac{\vec{r}}{2} \left| F \right| \vec{R} + \frac{\vec{r}}{2} \right\rangle \quad (4.157)$$

– преобразование Вейля для матрицы оператора  $F$ .

Рассматриваемое в этом разделе представление матрицы плотности называется смешанным. Отметим, что фигурирующие в формулах (4.153), (4.154), (4.156) величины являются матрицами в спиновом пространстве. Для них нет классического аналога.

В качестве примера получим функцию Вигнера для свободных фермионов со спином  $1/2$ .

В случае свободных частиц индекс  $i$  в формуле (4.150) равен  $i = (\vec{p}, \sigma)$ , а функция  $\psi_i(\vec{r}, \alpha)$  равна (2.39). Вероятность  $w_i$  нормирована условием (4.7):

$$\sum_i w_i = \sum_{\vec{p}\sigma} w_{\vec{p}\sigma} = 1.$$

Сравнивая это условие с выражением для полного числа частиц в системе

$$\sum_{\vec{p}\sigma} \bar{n}_{\vec{p}\sigma} = N,$$

где  $\bar{n}_{\vec{p}\sigma}$  – фермиевская функция распределения, получаем  $w_{\vec{p}\sigma} = \bar{n}_{\vec{p}\sigma} / N$ . Следовательно, матрица плотности (4.150) равна

$$\langle \vec{r}_1 \alpha_1 | \rho | \vec{r}_2 \alpha_2 \rangle = \delta_{\alpha_1 \alpha_2} \frac{1}{N} \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \bar{n}_{\vec{p}} \exp \left[ i \frac{\vec{p}}{\hbar} (\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \right]. \quad (4.158)$$

Здесь учтено условие полноты спиновых волновых функций

$$\sum_{\sigma} \chi_{\sigma}(\alpha_1) \chi_{\sigma}^*(\alpha_2) = \delta_{\alpha_1 \alpha_2}.$$

Подставляя (4.158) в формулу (4.151), получаем

$$f_{\alpha_1 \alpha_2}(\vec{p}, \vec{R}) = \frac{\delta_{\alpha_1 \alpha_2}}{N} \bar{n}_{\vec{p}}. \quad (4.159)$$

Функция распределения по координатам (4.153) в рассматриваемом случае постоянна:

$$\langle \vec{R} | \rho | \vec{R} \rangle = \frac{N}{2V}.$$

Вычислим вигнеровскую функцию распределения для электронов в магнитном поле (см. А.С. Кондратьев, В.П. Романов, Задачи по статистической физике, 1992). Как и в р. 1.7, считаем  $\vec{A} = (0, Hx, 0)$ . Подставляя функцию (1.146) в формулу (4.150), получаем

$$\begin{aligned} \langle \vec{r}_1 \alpha_1 | \rho | \vec{r}_2 \alpha_2 \rangle &= \frac{1}{NlL^2} \sum_{nk_y k_z \sigma} \frac{\bar{n}_{nk_z \sigma}}{\sqrt{\pi} 2^n n!} \exp \left[ -\frac{(x_1 - x_0)^2}{2l^2} - \right. \\ &\quad \left. -\frac{(x_2 - x_0)^2}{2l^2} + ik_y (y_1 - y_2) + ik_z (z_1 - z_2) \right] H_n \left( \frac{x_1 - x_0}{l} \right) \times \\ &\quad \times H_n \left( \frac{x_2 - x_0}{l} \right) \chi_{\sigma}(\alpha_1) \chi_{\sigma}^*(\alpha_2), \end{aligned}$$

где  $i = (n, k_y, k_z, \sigma)$ ,  $\bar{n}_i$  – функция Ферми. Переходя здесь к переменным  $\vec{r}, \vec{R}$ , подставляя результат в формулу (4.151), находим функцию распределения Вигнера:

$$\begin{aligned}
 f_{\alpha_1 \alpha_2}(\vec{p}, \vec{R}) = & \frac{1}{NL^2} \int d\vec{r} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}\right) \times \\
 & \times \sum_{nk_y k_z \sigma} \frac{\bar{n}_{nk_z \sigma}}{\sqrt{\pi} 2^n n!} \exp\left[-\frac{1}{2l^2} \left(X + \frac{x}{2} - x_0\right)^2 - \right. \\
 & \left. - \frac{1}{2l^2} \left(X - \frac{x}{2} - x_0\right)^2 + ik_y y + ik_z z\right] H_n\left(\frac{X + \frac{x}{2} - x_0}{l}\right) \times \\
 & \times H_n\left(\frac{X - \frac{x}{2} - x_0}{l}\right) \chi_\sigma(\alpha_1) \chi_\sigma^*(\alpha_2).
 \end{aligned} \tag{4.160}$$

Входящие сюда интегралы по  $y$  и  $z$  вычисляются при помощи фурье-преобразования дельта-функции. Тогда интеграл по  $x$  равен

$$\begin{aligned}
 & \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left[-\frac{i}{\hbar} p_x x - \frac{1}{l^2} \left(X + l^2 \frac{p_y}{\hbar}\right)^2 - \frac{x^2}{4l^2}\right] \times \\
 & \times H_n\left(\frac{X + l^2 \frac{p_y}{\hbar} + \frac{x}{2}}{l}\right) H_n\left(\frac{X + l^2 \frac{p_y}{\hbar} - \frac{x}{2}}{l}\right) = \\
 & = 2l(-1)^n \sqrt{\pi} 2^n n! e^{-\nu^2} L_n(2\nu^2),
 \end{aligned} \tag{4.161}$$

где

$$\nu^2 = \frac{1}{l^2} \left( X + l^2 \frac{p_y}{\hbar} \right)^2 + \frac{l^2}{\hbar^2} p_x^2,$$

$L_n$  – полином Лагерра. Подставляя это выражение в формулу (4.160), получаем окончательно

$$f_{\alpha_1 \alpha_2}(\vec{p}, \vec{R}) = \frac{2}{N} e^{-\nu^2} \sum_{n\sigma} (-1)^n \bar{n} \left( n, \frac{p_z}{\hbar}, \sigma \right) \times \\ \times L_n(2\nu^2) \chi_\sigma(\alpha_1) \chi_\sigma^*(\alpha_2). \quad (4.162)$$

Будучи выражена через кинетический импульс

$$\vec{P} = \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{R}),$$

функция (4.162) не зависит от  $\vec{R}$ , так как

$$\nu^2 = \frac{l^2}{\hbar^2} (P_x^2 + P_y^2).$$

Если пренебречь спиновым расщеплением уровней Ландау, формула (4.162) примет вид

$$f_{\alpha_1 \alpha_2}(\vec{p}, \vec{R}) = \frac{2}{N} \delta_{\alpha_1 \alpha_2} e^{-\nu^2} \sum_n (-1)^n \bar{n} \left( n, \frac{p_z}{\hbar} \right) L_n(2\nu^2). \quad (4.163)$$

Одночастичную матрицу плотности в координатном представлении можно выразить через среднее от произведения полевых операторов частиц:

$$\rho_{\alpha_1 \alpha_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \langle \vec{r}_1 \alpha_1 | \rho | \vec{r}_2 \alpha_2 \rangle = \frac{1}{N} \langle \psi_{\alpha_2}^+(\vec{r}_2) \psi_{\alpha_1}(\vec{r}_1) \rangle. \quad (4.164)$$

Чтобы убедиться в этом, вычислим среднее значение одночастичного оператора (2.45):

$$\langle F^{(1)} \rangle = \sum_\alpha \int d\vec{r} \langle \psi_\alpha^+(\vec{r}) f_{\vec{r}}^{(1)} \psi_\alpha(\vec{r}) \rangle. \quad (4.165)$$

Здесь оператор  $f_{\vec{r}}^{(1)}$  действует на  $\psi_\alpha(\vec{r})$ . Это среднее связано с матрицей (4.164) соотношением

$$\langle F^{(1)} \rangle = N \langle f^{(1)} \rangle = N \sum_{\alpha} \int d\vec{r}_1 \left[ f_{\vec{r}_1}^{(1)} \rho_{\alpha\alpha}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right] \Big|_{\vec{r}_2 = \vec{r}_1}. \quad (4.166)$$

Действительно, подставляя сюда (4.164), получаем выражение (4.165):

$$\begin{aligned} \langle F^{(1)} \rangle &= \sum_{\alpha} \int d\vec{r}_1 \left[ f_{\vec{r}_1}^{(1)} \langle \psi_{\alpha}^{+}(\vec{r}_2) \psi_{\alpha}(\vec{r}_1) \rangle \right] \Big|_{\vec{r}_2 = \vec{r}_1} = \\ &= \sum_{\alpha} \int d\vec{r}_1 \langle \psi_{\alpha}^{+}(\vec{r}_1) f_{\vec{r}_1}^{(1)} \psi_{\alpha}(\vec{r}_1) \rangle. \end{aligned}$$

Подставляя в (4.164) разложение полевых операторов фермионов по плоским волнам, получаем (4.105), где

$$\begin{aligned} \rho(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= \frac{1}{NV} \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} \langle a_{\vec{k}_1}^{+} a_{\vec{k}_2} \rangle \exp \left[ -i(\vec{k}_2 \vec{r}_2 - \vec{k}_1 \vec{r}_1) \right] = \\ &= \frac{1}{NV} \sum_{\vec{k}} \bar{n}_{\vec{k}} \exp \left[ i\vec{k}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \right]. \end{aligned}$$

Здесь  $\bar{n}_{\vec{k}}$  – фермиевская функция распределения. Переходя от суммирования по  $\vec{k}$  к интегрированию и выполняя интегрирование в сферических координатах с осью  $k_z$  вдоль вектора  $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ , находим при нулевой температуре

$$\rho(r) = \frac{1}{2\pi^2 N r^3} (\sin k_F r - k_F r \cos k_F r),$$

$k_F$  – фермиевское волновое число.

Более сложные матрицы плотности комплексов частиц будут рассмотрены в п. 4.15.

## 4.12. Уравнение Блоха

Статистический оператор (4.85) для канонического ансамбля Гиббса

$$C(\beta) = e^{-\beta H}, \quad (4.167)$$

нормированный условием  $\text{Sp} c = Z$ , может быть получен аналитическим продолжением оператора эволюции (1.99) на мнимую ось времени. (В теории поля такое продолжение называют виковским поворотом.) Другими словами, выполняя в (1.99) замену

$$\frac{i}{\hbar}t \rightarrow \beta,$$

получаем (4.167).

Полезно заменить обратную температуру  $\beta$  в (4.167) непрерывной вещественной переменной  $\tau$ , связанной с  $t$  соотношением

$$\frac{it}{\hbar} = \tau, \quad (4.168)$$

где  $0 \leq \tau \leq \beta$ . Тогда из (4.167) получаем оператор

$$C(\tau) = e^{-\tau H}. \quad (4.169)$$

Он удовлетворяет очевидному уравнению

$$\frac{\partial C(\tau)}{\partial \tau} = -HC(\tau) \quad (4.170)$$

и начальному условию

$$C(0) = 1. \quad (4.171)$$

Уравнение (4.170) для канонического ансамбля Гиббса получено Ф. Блохом и носит его имя.

Аналогичное уравнение для статоператора большого канонического ансамбля (4.94)

$$C(\beta) = e^{-\beta H'} \quad (4.172)$$

имеет вид

$$\frac{\partial C(\tau)}{\partial \tau} = -H'C(\tau), \quad (4.173)$$

где

$$C(0) = 1, \quad (4.174)$$

$H' = H - \mu N$  — гамильтониан большого канонического ансамбля.



Уравнение (4.170) после замены (4.168) переходит в уравнение Шредингера. Таким образом, методы, разработанные для решения уравнения Шредингера, могут использоваться в процессе решения уравнения Блоха.

Статистический оператор (4.167) позволяет плотность вероятности любой величины  $F$ , относящейся к системе, записать в виде

$$w(F) = \frac{\text{Sp}[C\delta(F - F)]}{\text{Sp}C}.$$

Чтобы убедиться в справедливости этой формулы, вычислим след в базисе собственных функций оператора  $F$  ( $F\Phi_F = F\Phi_F$ ):

$$w(F) = \frac{\int dF' \langle F' | C | F' \rangle \delta(F' - F)}{\int dF' \langle F' | C | F' \rangle}.$$

Среднее по ансамблю Гиббса значение любой функции  $f(F)$  равно

$$\langle f(F) \rangle = \frac{\text{Sp}[Cf(F)]}{\text{Sp}C} = \frac{\int dF' \langle F' | C | F' \rangle f(F')}{\int dF' \langle F' | C | F' \rangle}.$$

С другой стороны, по определению среднего

$$\langle f(F) \rangle = \int dF f(F) w(F).$$

Подставляя сюда  $w(F)$  и вычисляя интеграл с  $\delta$ -функцией, убеждаемся в справедливости написанной формулы для  $w(F)$ .

Если системой является одна бесспиновая частица в термостате, то уравнение (4.170) для матрицы плотности в координатном представлении принимает вид

$$-\frac{\partial}{\partial \tau} \langle \vec{r} | C(\tau) | \vec{r}' \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}} \langle \vec{r} | C(\tau) | \vec{r}' \rangle. \quad (4.175)$$

Начальное условие к нему получаем из (4.171) с учетом ортонормированности базиса  $\{|\vec{r}\rangle\}$ :

$$\langle \vec{r} | C(0) | \vec{r}' \rangle = \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (4.176)$$

Решение уравнения (4.175) с начальным условием (4.176) известно из теории диффузии частиц:

$$\langle \vec{r} | C(\tau) | \vec{r}' \rangle = \left( \frac{m}{2\pi\hbar^2\tau} \right)^{3/2} \exp \left[ -\frac{m}{2\hbar^2\tau} (\vec{r} - \vec{r}')^2 \right]. \quad (4.177)$$

След этой матрицы при  $\tau = \beta$  равен полученной ранее одночастичной статсумме (4.108) свободной частицы в термостате. Ее функция распределения по координатам равна  $1/V$  (см. р. 4.8).

Уравнения (4.170) и (4.173) удобно использовать в том случае, когда гамильтониан системы имеет вид

$$H' = H_0 + V, \quad (4.178)$$

где  $H_0' = H_0 - \mu N$ . Тогда, вычисляя производную

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \left[ e^{\tau H_0'} C(\tau) \right] = -e^{\tau H_0'} V C(\tau)$$

и интегрируя это уравнение с учетом начального условия (4.174), находим интегральное уравнение для  $C(\tau)$ :

$$e^{\tau H_0'} C(\tau) = 1 - \int_0^\tau d\tau' V_D(\tau') e^{\tau' H_0'} C(\tau'), \quad (4.179)$$

где

$$V_D(\tau) = e^{\tau H_0'} V e^{-\tau H_0'}$$

– аналог оператора в представлении Дирака (1.75). Уравнение (4.179) перепишем в виде

$$C(\tau) = C_0(\tau) - \int_0^\tau d\tau' C_0(\tau - \tau') V C(\tau'), \quad (4.180)$$

где

$$C_0(\tau) = e^{-\tau H_0'}.$$

Используя уже известный метод итераций (см. р. 1.4), представляем статоператор (4.172) в виде ряда:

$$C(\tau) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^{\tau} d\tau_1 \dots \int_0^{\tau} d\tau_n e^{-\tau H'_0} T_{\tau} [V_D(\tau_1) \dots V_D(\tau_n)], \quad (4.181)$$

где  $T_{\tau}$  – оператор хронологического упорядочения по переменной  $\tau$ . При  $\tau = \beta$  получаем отсюда большую статсумму системы в термостате:

$$\Xi = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^{\beta} d\tau_1 \dots \int_0^{\beta} d\tau_n \text{Sp} \left\{ e^{-\beta H'_0} T_{\tau} [V_D(\tau_1) \dots V_D(\tau_n)] \right\}. \quad (4.182)$$

Эта формула позволяет представить термодинамические величины системы в виде ряда по степеням взаимодействия  $V$ .

### 4.13. Матрица плотности и континуальные интегралы

Используя отмеченную в предыдущем разделе аналогию между оператором эволюции (1.99) и статистическим оператором (4.169), представим матрицу плотности в виде континуального интеграла.

Рассмотрим частицу, совершающую одномерное движение в потенциальном поле  $V(x)$ , в термостате. Амплитуда перехода частицы из точки  $(0, x_0)$  в точку  $(t, x)$  равна (1.111). Выполняя в формулах (1.109)-(1.111) замену (4.168), получаем матрицу плотности частицы в координатном представлении:

$$\begin{aligned} & \langle x' | \exp(-\beta H) | x \rangle = \\ &= \frac{\int Dx(\tau) \exp \left\{ - \int_0^{\beta} d\tau \left[ \frac{m}{2\hbar^2} \dot{x}^2(\tau) + V(x(\tau)) \right] \right\}}{\int D'x(\tau) \exp \left[ - \int_0^{\beta} d\tau \frac{m}{2\hbar^2} \dot{x}^2(\tau) \right]}. \end{aligned} \quad (4.183)$$

Теперь фейнмановскими траекториями являются кривые  $x(\tau)$ , соединяющие точки  $(0, x)$  и  $(\beta, x')$ . Точкой отмечена производная по  $\tau$ :

$$\dot{x}(\tau) = \frac{dx(\tau)}{d\tau}.$$

Остальные обозначения см. в п. 1.5.

В литературе часто используется переменная  $u = \hbar \tau$  (см. Р. Фейнман, А. Хибс, Квантовая механика и интегралы по траекториям, 1968; Р. Фейнман, Статистическая механика, 1975). Используя траектории  $x(u)$ , переписываем формулу (4.183) в виде

$$\begin{aligned} \langle x' | \exp(-\beta H) | x \rangle &= \\ &= \frac{\int Dx(u) \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta \hbar} du \left[ \frac{m}{2} \dot{x}^2(u) + V(x(u)) \right] \right\}}{\int D'x(u) \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta \hbar} du \frac{m}{2} \dot{x}^2(u) \right]}. \end{aligned} \quad (4.184)$$

Точкой в этой формуле обозначена производная по  $u$ .

Если частица свободная, матрица плотности получается из (1.105) в результате замены (4.168):

$$\langle x' | \exp(-\beta H_0) | x \rangle = \left( \frac{m}{2\pi \hbar^2 \beta} \right)^{1/2} \exp \left[ -\frac{m}{2\hbar^2 \beta} (x' - x)^2 \right]. \quad (4.185)$$

В трехмерном случае обобщением этой формулы является (4.177) при  $\tau = \beta$ . Статсумма свободной частицы, получаемая из формулы (4.177),

$$z = \int d\vec{r} \langle \vec{r} | e^{-\beta H_0} | \vec{r} \rangle,$$

совпадает с (4.108).

Заменяя  $t$  на  $-i\hbar\beta$  в формуле (1.142), получаем матрицу плотности одномерного осциллятора в термостате:

$$\begin{aligned} \langle x' | \exp(-\beta H) | x \rangle = & \left( \frac{m\omega}{2\pi\hbar \operatorname{sh}\beta\hbar\omega} \right)^{1/2} \times \\ & \times \exp \left\{ -\frac{m\omega}{2\hbar \operatorname{sh}\beta\hbar\omega} \left[ (x'^2 + x^2) \operatorname{ch}\beta\hbar\omega - 2x'x \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.186)$$

Она отличается от (4.114) нормировочным множителем.

Входящий в формулу (4.183) континуальный интеграл вычисляется при помощи теории возмущений. Поскольку эта теория для функций Грина будет изложена в следующей главе, мы предоставляем читателю возможность самостоятельно рассмотреть этот вопрос (см. Р. Фейнман, Статистическая механика, 1975, гл. 3).

#### 4.14. Матрица плотности и когерентные состояния

Прием, использованный в предыдущем разделе, позволяет получить матрицу плотности системы в термостате в базисе когерентных состояний. Для этого обратимся к матричным элементам оператора эволюции в этом базисе (см. (3.148)-(3.151)):

$$\begin{aligned} \langle z_f | U(t) | z_i \rangle &= \int D(z^*, z) \exp \left[ \frac{i}{\hbar} S(z^*, z) \right], \\ S(z^*, z) &= \int_0^t dt' \left\{ z^*(t') i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} z(t') - H[z^*(t'), z(t')] \right\} - i\hbar z^*(t) z(t), \\ D(z^*, z) &= \prod_t \left[ (2\pi i)^{(\eta-1)/2} dz^*(t) dz(t) \right]. \end{aligned}$$

Выполняя в этих формулах замену (4.168), получаем матрицу плотности в базисе когерентных состояний:

$$\langle z_f | e^{-\beta H} | z_i \rangle = \int D(z^*, z) \exp \left[ -S(z^*, z) \right], \quad (4.187)$$

где

$$S(z^*, z) = \int_0^\beta d\tau \left\{ z^*(\tau) \frac{\partial}{\partial \tau} z(\tau) + H[z^*(\tau), z(\tau)] \right\} - z^*(\beta) z(\beta) \quad (4.188)$$

– эффективное действие,

$$D(z^*, z) = \prod_\tau \left[ (2\pi i)^{(\eta-1)/2} dz^*(\tau) dz(\tau) \right]. \quad (4.189)$$

– мера интегрирования. Здесь  $\{z^*(\tau), z(\tau)\}$  – фейнмановские траектории, соединяющие точки  $(0, z_i)$  и  $(\beta, z_f)$ . Они подчиняются условиям

$$|z(0)\rangle = |z_i\rangle, \quad \langle z(\beta)| = \langle z_f|. \quad (4.190)$$

Вычисляя след матрицы (4.187), получаем статсумму системы

$$Z = \text{Sp} e^{-\beta H} = \int_{|z(\beta)\rangle = -\eta |z(0)\rangle} D(z^*, z) \exp[-S(z^*, z)]. \quad (4.191)$$

Применение этой формулы к идеальным ферми- и бозе-газам рассмотрено в р. 3.7.

Запишем уравнение Лиувилля (4.58) в матричном виде, используя в качестве базиса когерентные состояния (см. статью П. Каррузерса и М. Ньюто в сборнике «Когерентные состояния в квантовой теории», 1972). В этом базисе диагональный матричный элемент матрицы плотности удовлетворяет уравнению:

$$\begin{aligned} i\hbar \langle z | \frac{\partial \rho}{\partial t} | z \rangle &= \frac{1}{\pi} \int d^2 z' \times \\ &\times [\langle z | H | z' \rangle \langle z' | \rho | z \rangle - \langle z | \rho | z' \rangle \langle z' | H | z \rangle], \end{aligned} \quad (4.192)$$

где использовано условие полноты базиса (3.23)

$$\frac{1}{\pi} \int d^2 z |z\rangle \langle z| = 1.$$

Убедимся в том, что для расчета  $\langle z | \rho | z \rangle$  недиагональные элементы  $\langle z | \rho | z' \rangle$  не нужны.

Предположим, что операторы  $H$  и  $\rho$  записаны в нормальной форме:

$$A = \sum_{mn} A_{mn} (a^+)^m a^n. \quad (4.193)$$

Тогда из формулы (3.29) следует

$$\langle z | A | z' \rangle = \langle z | z' \rangle A(z^*, z') = \langle z | z' \rangle \sum_{mn} A_{mn} (z^*)^m (z')^n. \quad (4.194)$$

Подставляя матрицы  $\langle z | H | z' \rangle$  и  $\langle z' | \rho | z \rangle$  в таком виде в правую часть уравнения (4.192), приходим к интегралам

$$\frac{1}{\pi} \int d^2 z' (z^*)^m (z')^n \langle z | z' \rangle \langle z' | \rho | z \rangle,$$

где  $m$  и  $n$  – целые числа. Используем формулу

$$\frac{1}{\pi} \int d^2 z' e^{-|z'|^2} (z')^l (z^*)^m = (l! m!)^{1/2} \delta_{lm}.$$

Тогда получим

$$\begin{aligned} \frac{1}{\pi} \int d^2 z' \exp(z^* z' - |z'|^2) f(z'^*) &= f(z^*), \\ \frac{1}{\pi} \int d^2 z' \exp(z^* z' - |z'|^2) (z')^n f(z'^*) &= \left( \frac{\partial}{\partial z^*} \right)^n f(z^*), \\ \frac{1}{\pi} \int d^2 z' \exp(z z'^* - |z'|^2) f(z') &= f(z), \\ \frac{1}{\pi} \int d^2 z' \exp(z z'^* - |z'|^2) (z'^*)^n f(z') &= \left( \frac{\partial}{\partial z} \right)^n f(z), \end{aligned} \quad (4.195)$$

где  $f(z)$  – разложимая в ряд Тейлора функция. Мы предоставляем возможность читателю самому проверить эти формулы. В них использовано перекрытие когерентных состояний (3.19). Например, если оператор  $H$ , имеющий вид

(4.193), содержит только оператор  $a$ , т. е.  $m=0$ ,  $n=1$ , то первое слагаемое в правой части уравнения (4.192) содержит интеграл

$$\frac{1}{\pi} \int d^2 z' z' \langle z | z' \rangle \langle z' | \rho | z \rangle = \left( z + \frac{\partial}{\partial z^*} \right) \rho(z^*, z).$$

Здесь использовано перекрытие (3.19) и второе тождество (4.195). Напомним, что комплексные числа  $z$  и  $z^*$  в (4.195) независимы. Аналогично получаем

$$\begin{aligned} \langle z | A \rho | z \rangle &= \frac{1}{\pi} \int d^2 z' \langle z | z' \rangle^2 A(z^*, z') \rho(z'^*, z) = \\ &= e^{-|z|^2} \sum_{mn} A_{mn}(z^*)^m \left( \frac{\partial}{\partial z^*} \right)^n \left[ e^{z^* z} \rho(z^*, z) \right] = \\ &= e^{-|z|^2} A\left(z^*, \frac{\partial}{\partial z^*}\right) \left[ e^{z^* z} \rho(z^*, z) \right]. \end{aligned} \quad (4.196)$$

Используя эту формулу в правой части (4.192), убеждаемся в том, что для расчета  $\langle z | \rho | z \rangle$  нужны только диагональные элементы матрицы плотности в базисе когерентных состояний.

Формула (4.196) позволяет среднее значение величины  $A$  в смешанном состоянии записать в виде

$$\langle A \rangle = \text{Sp}(\rho A) = \frac{1}{\pi} \int d^2 z e^{-|z|^2} A\left(z^*, \frac{\partial}{\partial z^*}\right) \left[ e^{z^* z} \rho(z^*, z) \right]. \quad (4.197)$$

Эта формула показывает, что для вычисления средних требуются лишь диагональные матричные элементы матрицы плотности в представлении когерентных состояний.

## 4.15. Частичные матрицы плотности

До сих пор мы изучали общие свойства полной матрицы плотности системы частиц (4.15) и ее частный случай — одночастичную матрицу плотности (4.101). Последней было достаточно для изучения простейших систем, рассмотренных в



предыдущих разделах. В этом разделе и в гл. 6 будет кратко рассмотрен систематический метод описания системы взаимодействующих частиц в смешанном состоянии, предложенный Н.Н. Боголюбовым (см. М.М. Боголюбов, Лекції з квантової статистики, 1949; Н.Н. Боголюбов (мл.), Введение в квантовую статистическую механику, 1984; А.И. Ахиезер, С.В. Пелетминский, Методы статистической физики, 1977; И.П. Базаров, Э.В. Геворкян, П.Н. Николаев, Неравновесная термодинамика и физическая кинетика, 1989). Метод Н.Н. Боголюбова основан на введении частичных матриц плотности и статистических операторов комплексов частиц.

Рассмотрим систему  $N$  одинаковых частиц, взаимодействующих между собой и с внешним полем. Пусть  $x_1, x_2, \dots, x_N$  – переменные первой, второй, ...,  $N$ -й частиц, от которых зависит волновая функция системы  $\psi(x_1, \dots, x_N, t)$ . В частности, под  $x$  можно понимать  $(\vec{r}, \alpha)$ ,  $(\vec{p}, \sigma)$  или любой другой полный набор величин для одной частицы. Полная матрица плотности системы в  $x$ -представлении равна (см. (4.34), (4.35))

$$\begin{aligned} \rho(x_1, \dots, x_N; x'_1, \dots, x'_N, t) &= \\ &= \sum_n w_n \psi_n(x_1, \dots, x_N, t) \psi_n^*(x'_1, \dots, x'_N, t). \end{aligned} \quad (4.198)$$

Здесь учитывается зависимость  $\rho$  от времени, важная в задачах кинетики. В дальнейшем аргумент  $t$  будем опускать.

При исследовании макросистем обычно необходимо иметь не полную матрицу плотности (4.198), а более простые одночастичную, двухчастичную, ...,  $s$ -частичную матрицы плотности системы взаимодействующих частиц или соответствующие им статоператоры. Введем эти операторы, определив их как частичные свертки полного статоператора  $\rho(1, \dots, N)$ , т. е. через следы по части переменных:

$$\rho_1(1) = \text{Sp}_{(2...N)} \rho \quad (4.199)$$

– одночастичный статоператор,

$$\rho_2(1,2) = \text{Sp}_{(3...N)} \rho \quad (4.200)$$

– двухчастичный статоператор, ... ,

$$\rho_s(1,...,s) = \text{Sp}_{(s+1,...,N)} \rho \quad (4.201)$$

–  $s$ -частичный статоператор. В матричном  $x$ -представлении соотношения (4.199)–(4.201) выглядят так:

$$\rho_1(x_1; x'_1) = \sum_{x_2...x_N} \rho(x_1, x_2, ..., x_N; x'_1, x_2, ..., x_N) \quad (4.202)$$

– одночастичная матрица плотности,

$$\rho_2(x_1, x_2; x'_1, x'_2) = \sum_{x_3...x_N} \rho(x_1, x_2, x_3, ..., x_N; x'_1, x'_2, x_3, ..., x_N) \quad (4.203)$$

– двухчастичная матрица плотности, ... ,

$$\begin{aligned} \rho_s(x_1, ..., x_s; x'_1, ..., x'_s) = \\ = \sum_{x_{s+1}...x_N} \rho(x_1, ..., x_s, x_{s+1}, ..., x_N; x'_1, ..., x'_s, x_{s+1}, ..., x_N) \end{aligned} \quad (4.204)$$

–  $s$ -частичная матрица плотности. В этих формулах  $\sum_x$

означает суммирование по дискретным переменным и интегрирование по переменным, изменяющимся непрерывно.

Из формул (4.199)–(4.204) видно, что

$$\begin{aligned} \text{Sp} \rho_1(1) = \text{Sp} \rho_2(1,2) = ... = \text{Sp} \rho_s(1,...,s), \\ \rho_s(1,...,s) = \text{Sp}_{(s+1)} \rho_{s+1}(1,...,s+1). \end{aligned} \quad (4.205)$$

Операторы  $\rho_s$  ( $s = 1, 2, ..., N$ ) эрмитовы и обладают свойствами симметрии

$$P \rho_s = \rho_s P = \rho_s \quad (4.206)$$

в случае бозонов,

$$P \rho_s = \rho_s P = (-1)^P \rho_s \quad (4.207)$$

в случае фермионов. Здесь  $P$  – оператор перестановки частиц.

Убедимся в том, что для нахождения средних значений динамических величин аддитивного типа

$$A = \sum_{b=1}^N a_b$$

достаточно знать лишь одночастичный статоператор. Действительно,

$$\langle A \rangle = \sum_{b=1}^N \text{Sp}(a_b \rho). \quad (4.208)$$

Поскольку оператор  $\rho$  симметричен относительно любой перестановки номеров частиц, то все слагаемые в (4.208) одинаковы, поэтому

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= N \text{Sp}(a_1 \rho) = N \text{Sp}_{(1 \dots N)}(a_1 \rho) = \\ &= N \text{Sp}_{(1)} \text{Sp}_{(2 \dots N)}(a_1 \rho) = N \text{Sp}_{(1)} a_1 \text{Sp}_{(2 \dots N)} \rho = \\ &= N \text{Sp}_{(1)}(a_1 \rho_1(1)). \end{aligned} \quad (4.209)$$

В случае величины бинарного типа

$$B = \sum_{a < c} b_{ac} \quad (b_{ac} = b_{ca})$$

имеем

$$\begin{aligned} \langle B \rangle &= \sum_{a < c} \text{Sp}(b_{ac} \rho) = \frac{N(N-1)}{2} \text{Sp}_{(1 \dots N)}(b_{12} \rho) = \\ &= \frac{N(N-1)}{2} \text{Sp}_{(12)} b_{12} \text{Sp}_{(3 \dots N)} \rho = \frac{N(N-1)}{2} \text{Sp}_{(12)}(b_{12} \rho_2(1, 2)). \end{aligned} \quad (4.210)$$

Таким образом, среднее значение величины бинарного типа выражается через двухчастичный статистический оператор. Методы расчета  $\rho_1(1)$  и  $\rho_2(1, 2)$  без предварительного нахождения  $\rho$  будут рассмотрены в шестой главе.

#### 4.16. Характеристическая функция

В теории смешанных и чистых состояний часто приходится иметь дело со средними типа  $\langle q^2 \rangle$ ,  $\langle p^2 \rangle$ , т. е. с моментами высших порядков наблюдаемых величин. Момент  $l$ -го порядка величины  $A$  определяется соотношением

$$\langle A^l \rangle = \text{Sp}[\rho(t) A^l], \quad (4.211)$$

где статоператор  $\rho$  и оператор  $A$  взяты в представлении Шредингера. Эти величины удобно вычислять при помощи характеристической функции (см. У. Люиселл, Излучение и шумы в квантовой электронике, 1972).

Характеристическая функция  $C_A(u)$  является производящей функцией для моментов высших порядков наблюдаемой  $A$ . Она определяется формулой

$$C_A(u) = \langle e^{iuA} \rangle = \text{Sp}[\rho(t) e^{iuA}], \quad (4.212)$$

где  $u$  – вещественный параметр. Действительно,  $l$ -й момент величины  $A$  равен

$$\langle A^l \rangle = \frac{\partial^l}{\partial (iu)^l} C_A(u) \Big|_{u=0}. \quad (4.213)$$

Таким образом, зная  $C_A(u)$ , моменты величины  $A$  получаем простым дифференцированием.

Представим характеристическую функцию в другой форме. Используя формулы (1.36) и (4.20), из (4.212) получаем

$$C_A(u) = \sum_i w_i \langle \psi_i(t) | e^{iuA} | \psi_i(t) \rangle. \quad (4.214)$$

Пусть оператор  $A$  имеет сплошной спектр. Тогда, используя условия ортонормированности и полноты (1.27), (1.28) собственных векторов этого оператора, перепишем (4.214) в виде

$$C_A(u) = \sum_i w_i \int_{-\infty}^{\infty} da \left| \langle \psi_i(t) | a \rangle \right|^2 e^{iua}, \quad (4.215)$$

где  $A|a\rangle = a|a\rangle$ . В этой формуле фигурирует  $\left| \langle \psi_i(t) | a \rangle \right|^2 da$  – вероятность обнаружить в момент  $t$  в чистом состоянии  $|\psi_i(t)\rangle$  величину  $a$  в интервале  $da$ . Но вероятность обнаружить  $a$  между  $a$  и  $a + da$  в смешанном состоянии равна

$$p(a)da = \sum_i w_i \left| \langle \psi_i | a \rangle \right|^2 da \quad (4.216)$$

(см. р. 4.2). Следовательно, сравнивая (4.215) и (4.216), получаем

$$p(a) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} du e^{-iua} C_a(u). \quad (4.217)$$

Эта формула позволяет находить функции распределения наблюдаемых величин в смешанном ансамбле, если известна характеристическая функция для этих величин.

#### 4.17. Матрица плотности и измерения

В р. 4.1 отмечалось, что в процессе измерения над квантовой системой она переходит из одного состояния в другое. Рассмотрим этот процесс подробнее (см. Физический энциклопедический словарь, 1963, т. 3, с. 159; А.И. Ахиезер, С.В. Пелетминский, Методы статистической физики, 1977).

Предположим, что в результате предварительного измерения полного набора величин система “приготовлена” для следующего измерения в чистом состоянии  $\psi_0(x)$ . Здесь  $x$  – набор координат частиц системы. Пусть  $F$  – оператор величины, подлежащей измерению. Его собственные значения

$F_n$  и функции  $\Phi_n$  удовлетворяют уравнению (4.1). Разложим  $\psi_0$  по базису  $\{\Phi_n\}$ :

$$\psi_0(x) = \sum_n C_n \Phi_n(x).$$

Предположим, что измерительный прибор определяет величину, которой соответствует эрмитовский оператор  $G$  с собственными функциями  $\nu_m(y)$  и собственными значениями  $g_m$ . Здесь  $y$  — координаты частиц прибора. По показаниям прибора  $g_m$  необходимо определить  $F_n$ .

До измерения волновая функция системы и прибора была мультипликативной:

$$\psi_0(x, y) = \sum_n C_n \Phi_n(x) \nu_0(y),$$

где  $\nu_0(y)$  — волновая функция прибора до измерения. После взаимодействия системы с прибором их общая волновая функция будет иметь вид

$$\psi(x, y) = \sum_{nm} a_{nm} \Phi_n(x) \nu_m(y) \quad (4.218)$$

(см. (4.46)). Чтобы измерительный прибор был пригоден для измерения, он должен обеспечить однозначное соответствие между показанием  $g_m$  и значением  $F_n$  измеряемой величины. Для этого необходимо, чтобы функция (4.218) имела вид

$$\psi(x, y) = \sum_n a_n \Phi_n(x) \nu_n(y),$$

причем для идеального измерительного прибора  $a_n = c_n$ . Тогда среднее значение некоторого оператора  $A$ , действующего на  $x$ , в силу ортонормированности функций  $\{\nu_n\}$  будет равно

$$\langle A \rangle = \sum_n w_n \int dx \Phi_n^*(x) A_x \Phi_n(x),$$

где  $w_n = |a_n|^2 = |c_n|^2$ . Сравнивая эту формулу с (4.10), убеждаемся в том, что после измерения система окажется в смешанном состоянии.

## Приложение

В этом Приложении мы получим матрицу плотности осциллятора в термостате (4.114), используя интегральное представление полиномов Эрмита

$$H_n(y) = \frac{e^{y^2}}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} du (-2iu)^n e^{-u^2 + 2iyu} \quad (\text{П.1})$$

и гауссов интеграл (3.79). Подставляя (П.1) в (4.110), получаем

$$\begin{aligned} \rho(x, x') = & z^{-1} \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/2} \frac{1}{\pi} \exp \left[ \frac{m\omega}{2\hbar} (x^2 + x'^2) \right] \int_{-\infty}^{\infty} du \times \\ & \times \int_{-\infty}^{\infty} dv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-2uv)^n}{n!} \exp \left[ -\beta\hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) - u^2 + 2i\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}xu - \right. \\ & \left. - v^2 + 2i\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x'v \right]. \end{aligned} \quad (\text{П.2})$$

Сумма по  $n$  равна

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-2uv)^n}{n!} \exp \left[ -\beta\hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \right] = \exp \left( -\frac{\beta\hbar\omega}{2} - 2uve^{-\beta\hbar\omega} \right). \quad (\text{П.3})$$

Следовательно,

$$\begin{aligned}
\rho(x, x') = & z^{-1} \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/2} \frac{1}{\pi} \exp \left[ -\frac{\beta\hbar\omega}{2} + \frac{m\omega}{2\hbar} (x^2 + x'^2) \right] \times \\
& \times \int_{-\infty}^{\infty} du \int_{-\infty}^{\infty} dv \exp \left[ -2uve^{-\beta\hbar\omega} - u^2 + 2i\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}xu - \right. \\
& \left. - v^2 + 2i\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x'v \right].
\end{aligned} \tag{П.4}$$

Входящий сюда интеграл имеет вид гауссова интеграла (3.79) и равен

$$\begin{aligned}
& \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dx_n \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{kl}^n A_{kl} x_k x_l + i \sum_{k=1}^n b_k x_k \right] = \\
& = \frac{(2\pi)^{n/2}}{(\det A)^{1/2}} \exp \left( -\frac{1}{2} \sum_{kl} A_{kl}^{-1} b_k b_l \right),
\end{aligned} \tag{П.5}$$

где  $A$  – положительно определенная симметричная матрица. В нашем случае

$$\begin{aligned}
A &= 2 \begin{pmatrix} 1 & e^{-\beta\hbar\omega} \\ e^{-\beta\hbar\omega} & 1 \end{pmatrix}, & \det A &= 4(1 - e^{-2\beta\hbar\omega}), \\
A^{-1} &= \frac{1}{2(1 - e^{-2\beta\hbar\omega})} \begin{pmatrix} 1 & -e^{-\beta\hbar\omega} \\ -e^{-\beta\hbar\omega} & 1 \end{pmatrix}, \\
b_1 &= 2x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}, & b_2 &= 2x'\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}.
\end{aligned}$$

Подставляя эти выражения, а также (4.111) в



$$\rho(x, x') = z^{-1} \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/2} \frac{1}{\pi} \exp \left[ -\frac{\beta\hbar\omega}{2} + \frac{m\omega}{2\hbar} (x^2 + x'^2) \right] \times \\ \times \frac{2\pi}{(\det A)^{1/2}} \exp \left( -\frac{1}{2} \sum_{kl} A_{kl}^{-1} b_k b_l \right),$$

приходим к формуле (4.114). Изложенный здесь метод применим и к электрону в магнитном поле.

### Задачи

1. Убедитесь в том, что собственные числа статоператора удовлетворяют неравенствам  $0 \leq \rho_n \leq 1$ .
2. Найдите матрицу плотности для неполяризованного пучка света (см. К. Блум, Теория матрицы плотности и ее приложения, 1983).
3. Используя уравнения (4.58) и (4.65), покажите, что если гамильтониан равновесной системы имеет вид  $H_0 + \varepsilon H_1$ , где  $\varepsilon \ll 1$ , то в линейном приближении по  $\varepsilon$  матрица плотности в  $n$ -представлении, в котором гамильтониан  $H_0$  диагонален ( $H_0 |n\rangle = E_n |n\rangle$ ), равна

$$\rho_{n'n} = \rho_0(E_n) \delta_{n'n} + \varepsilon \langle n' | H_1 | n \rangle \frac{\rho_0(E_{n'}) - \rho_0(E_n)}{E_{n'} - E_n},$$

где  $\rho_0(E_n)$  – диагональный матричный элемент оператора  $\rho_0$  (см. Ч. Киттель, Элементарная статистическая физика, 1960).

4. Используя матрицу плотности в координатном представлении, найдите  $\langle x^2 \rangle$  и  $\langle p_x^2 \rangle$  одномерного гармонического осциллятора (см. В.В. Ульянов, Задачи по квантовой механике и квантовой статистике, 1980).
5. Найдите матрицы плотности систем, рассмотренных в р. 4.8, в импульсном представлении.
6. Получите матрицу плотности частицы в термостате в одномерном и двумерном случаях.
7. Вычислите матрицу плотности электрона в термостате, совершающего двумерное движение в магнитном поле, перпендикулярном плоскости движения.
8. Вычислите матрицу плотности трехмерного гармонического осциллятора в термостате.
9. Найдите матрицу плотности электрона в скрещенных электрическом и магнитном полях.
10. Убедитесь в том, что матрица плотности системы с гамильтонианом  $H\left(q, -i\hbar \frac{\partial}{\partial q}\right)$  в термостате ( $q$  – набор координат частиц) может быть записана в виде
 
$$Z^{-1} \langle q | e^{-\beta H} | q' \rangle = Z^{-1} e^{-\beta H(q)} \delta(q - q').$$
11. Найдите спиновую матрицу плотности электрона в магнитном поле в представлении, диагонализующем спиновый оператор Паули  $\sigma_z$ , а также в представлении, диагонализующем  $\sigma_x$ . Вычислите среднее значение  $\langle \sigma_z \rangle$  в этих представлениях. Ось  $z$  направлена вдоль магнитного поля (см. Р. Кубо, Статистическая механика, 1967).

12. Гамильтониан  $N$  различных частиц равен

$$H = \sum_a \frac{p_a^2}{2m} + V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N).$$

Найдите матрицу плотности системы

$\langle \vec{r}_1 \dots \vec{r}_N | \exp(-\beta H) | \vec{r}'_1 \dots \vec{r}'_N \rangle$ . Покажите, что в пределе  $\hbar \rightarrow 0$

статистическая сумма системы  $Z = \text{Sp} \exp(-\beta H)$  совпадает с классическим значением (см. Р. Кубо, Статистическая механика, 1967).

13. Получите вигнеровскую функцию распределения для гармонического осциллятора в термостате (см. В.В. Ульянов, Задачи по квантовой механике и квантовой статистике, 1980).

14. Выполните предельный переход к классической статистике в выражении для вигнеровской функции распределения электронов в магнитном поле (4.163) (см. А.С. Кондратьев, В.П. Романов, Задачи по статистической физике, 1992).

15. Найдите решение уравнения Блоха (4.170) для трехмерного изотропного гармонического осциллятора в термостате и для электрона в магнитном поле.

16. Используя континуальное интегрирование, найдите матрицу плотности электрона в магнитном поле.

17. Используйте теорию возмущений по  $V$  для расчета континуального интеграла (4.183) (см. Р. Фейнман, Статистическая механика, 1975, гл. 3).

18. Запишите уравнение (4.192) для одномерного гармонического осциллятора. Перейдите в нем к переменным действие-угол:

$$J = z^* z, \quad \varphi = \frac{1}{2i} \ln \frac{z}{z^*}.$$

Найдите решение полученного уравнения (см. сб. «Когерентные состояния в квантовой теории», 1972).

19. Покажите, что средняя квадратичная флуктуация аддитивной величины  $A$  равна (см. р. 4.15)

$$\begin{aligned} \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle &= N \text{Sp} \left[ (a_1^2 - a^2) \rho_1(1) \right] + \\ &+ N(N-1) \text{Sp} \{ a_1 a_2 [\rho_2(1,2) - \rho_1(1) \rho_1(2)] \}, \end{aligned}$$

где  $a = \text{Sp}(a_1 \rho_1(1))$ . Используйте эту формулу для нахождения средней квадратичной флуктуации числа частиц  $n$  в некотором объеме стационарной и однородной системы:

$$\langle (n - \langle n \rangle)^2 \rangle = \langle n \rangle \left\{ 1 + \frac{4\pi}{v} \int_0^\infty dr r^2 [g(r) - 1] \right\},$$

где  $v$  – удельный объем,  $g(r)$  – радиальная функция распределения. Как  $g(r)$  связана с двухчастичной функцией распределения?

20. Получите характеристические функции для величин  $x$  и  $p_x$  чистого и смешанного ансамблей одномерных гармонических осцилляторов. Используйте характеристические функции для нахождения  $\langle x^2 \rangle$  и  $\langle p_x^2 \rangle$  (см. У. Люиселл, Излучение и шумы в квантовой электронике, 1972, р. 6.9).

**Навчальне видання**

**Єрмолаєв Олександр Михайлович**

**Рашба Георгій Ілліч**

**Лекції з квантової статистики і кінетики**

**4. Матриця густини**

Російською мовою

Друкується в авторській редакції

Відповідальний за випуск О.І. Любімов

Підп. до друку .09. Формат 60х84 1/16. Папір офсетний.

Друк ризографічний. Ум. друк. арк. . Обл.-вид. арк. .

Наклад 50 прим. Ціна договірна.

---

61077, Харків, майдан Свободи, 4  
Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна  
Організаційно-видавничий відділ НМЦ

Надруковано ФОП “Петрова І.В.”  
61144, Харків-144, вул. Гв. Широнінців 79-в, к. 137  
Свідоцтво про державну реєстрацію ВОО № 948011  
від 03.01.03